

Titre: Adaptation de maillage pour les problèmes à surfaces libres en
Title: mécanique des fluides

Auteur: Yvan Mokwinski
Author:

Date: 2012

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Mokwinski, Y. (2012). Adaptation de maillage pour les problèmes à surfaces libres
Citation: en mécanique des fluides [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal].
PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/1068/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/1068/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:** Steven Dufour, & François Guibault
Advisors:

Programme: Mathématiques de l'ingénieur
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ADAPTATION DE MAILLAGE POUR LES PROBLÈMES À SURFACES
LIBRES EN MÉCANIQUE DES FLUIDES

YVAN MOKWINSKI
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(MATHÉMATIQUES DE L'INGÉNIEUR)
DÉCEMBRE 2012

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

ADAPTATION DE MAILLAGE POUR LES PROBLÈMES À SURFACES
LIBRES EN MÉCANIQUE DES FLUIDES

présenté par : MOKWINSKI Yvan

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. AUDET Charles, Ph.D., président

M. DUFOUR Steven, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. GUIBAULT François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. LAFOREST Marc, Ph.D., membre

M. FORTIN André, Ph.D., membre

DÉDICACE

Je dédicace cette thèse à toutes les personnes qui ont témoigné leur confiance et qui ont fait preuve de patience.

REMERCIEMENTS

Je remercie l'École Polytechnique de Montréal, mon directeur de recherche Steven Dufour et mon co-directeur de recherche François Guibault. Je remercie également Marc Laforest, Julien Dompierre et Marie-Gabrielle Vallet.

RÉSUMÉ

Le sujet de cette thèse de doctorat est l'adaptation de maillage pour les problèmes à surfaces libres en mécanique des fluides. Nous abordons différents aspects de la modélisation et de la simulation numérique des écoulements à surfaces libres. Nous proposons l'utilisation d'une approche eulérienne pour modéliser les interfaces, et nous avons choisi la méthode de la pseudo-concentration afin que les changements topologiques des fluides ne soient pas une source de complexité des algorithmes. Les difficultés liées à cette méthode de capture de l'interface sont identifiées et nous proposons des solutions pour améliorer la précision des calculs qui n'est pas au rendez-vous si la méthodologie n'est pas correctement élaborée. L'adaptation de maillage est une composante essentielle de la méthodologie proposée. Une résolution adéquate du maillage là où cela est nécessaire permet de rendre la méthode de la pseudo-concentration compétitive.

Dans cette thèse, nous abordons trois thèmes. Pour être capable d'inclure les problèmes régis par la tension superficielle, nous avons développé une méthodologie pour le calcul numérique de la force capillaire. Pour proposer une simulation numérique la plus fidèle possible vis-à-vis du phénomène physique étudié où la conservation des paramètres physiques est essentielle, nous avons développé une méthodologie de réinitialisation de la variable eulérienne. Enfin, pour être capable d'appliquer l'adaptation de maillage sur des simulations transitoires, nous avons proposé une méthodologie incluant la définition des métriques adéquates, l'interpolation des fonctions éléments-finis entre deux maillages ainsi que l'insertion d'un prédicteur dans le processus d'adaptation. Les principales contributions de cette thèse sont illustrées par la résolution numérique de cas tests classiques impliquant la modélisation des surfaces libres.

ABSTRACT

This Ph.D. thesis deals with mesh adaptivity for the numerical simulation of free surface problems in fluids mechanics. We study various aspects of the modeling and the numerical simulation of free surface flows. We use an Eulerian approach for the modeling of the dynamics of the interface. We opt for the pseudo-concentration method so that topologic changes do not add to the algorithmic complexity of the overall numerical strategy. The challenges related to the use of this interface capturing method are detailed and we propose a set of cures to improve the accuracy of the numerical computations when the methodology is not well chosen. Mesh adaptivity is a central component of the proposed methodology. A good mesh helps making the pseudo-concentration method competitive.

We pursue three specific objectives in this thesis. To be able to model problems with surface tension, we developed a numerical methodology for the computation of capillary force. The developed methodology includes the reinitialization of the Eulerian marker to allow the accurate modeling of the physics of the problems under study. Finally, in order to perform mesh adaptivity to transient simulations, we propose a methodology which includes the definition of appropriate metrics, the interpolation of finite element functions between meshes and the introduction of a predictor in the mesh adaptivity process. The numerical simulation of verification problems involving the modeling of the dynamics of free surfaces illustrates the contributions.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	xi
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xxiv
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 LA MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS À SURFACES LIBRES	6
1.1 Les équations	7
1.1.1 Les équations de Navier-Stokes	8
1.1.2 La modélisation de la dynamique des surfaces libres	13
1.1.3 Adimensionnalisation des équations de Navier-Stokes	22
1.2 La discrétisation des équations	24
1.2.1 La discrétisation en espace	27
1.2.2 La discrétisation en temps	38
1.2.3 La méthode de Galerkin discontinue appliquée à l'équation de transport	43

1.3	Le calcul numérique de la force capillaire	49
1.3.1	Les courants parasites	51
1.3.2	Le calcul de la normale à l'interface	54
1.3.3	Le calcul de la courbure à l'interface	57
1.4	La mise-à-jour de la variable eulérienne	60
1.5	Les estimateurs d'erreurs	63
1.5.1	Les erreurs d'interpolation pour la pseudo-concentration . . .	63
1.5.2	Les estimateurs d'erreur pour l'équation de transport	65
1.6	L'adaptation de maillage	67
1.6.1	La métrique	69
1.6.2	Le point fixe d'adaptation de maillage	75
1.6.3	L'adaptation en temps	83
CHAPITRE 2 LE CALCUL NUMÉRIQUE DE LA FORCE CAPILLAIRE		88
2.1	Les régularisations	89
2.1.1	Les erreurs liées aux régularisations	96
2.1.2	Illustration des erreurs de régularisation	105
2.2	Opérateur de quasi-interpolation	107
2.2.1	L'approximation locale au sens des moindres carrés	110
2.2.2	La sélection des paramètres de l'approximation au sens des moindres carrés	117
2.2.3	Discrétisation globale de l'opérateur	124
2.2.4	Application à la reconstruction des dérivées	129
2.3	Application au calcul de la force volumique	141
2.3.1	Le calcul de la normale	142
2.3.2	Le calcul de la courbure	147
2.4	Le problème de Laplace	152
2.5	Conclusion	158

CHAPITRE 3	LA MISE-À-JOUR DE LA VARIABLE EULÉRIENNE	162
3.1	La discrétisation explicite de la surface libre	170
3.1.1	La localisation de la surface libre	171
3.1.2	La paramétrisation de l'interface	175
3.1.3	Le calcul de la distance signée à la surface libre paramétrée	182
3.2	L'application à la réinitialisation de la pseudo-concentration	186
3.2.1	L'impact de la réinitialisation sur la conservation de la quantité de matière	189
3.3	Reconstruction de la normale et de la courbure	194
3.3.1	L'évaluation discontinue de la viscosité et de la densité	201
3.4	Conclusion	203
CHAPITRE 4	L'ADAPTATION	205
4.1	Résumé	205
4.2	La métrique	208
4.2.1	La métrique pour la pseudo-concentration	211
4.2.2	La métrique pour le champ de vitesse	216
4.2.3	La conformité de la métrique	217
4.2.4	L'intersection de la métrique	220
4.3	L'interpolation entre deux maillages	222
4.3.1	L'interpolation par évaluation ponctuelle	224
4.3.2	L'interpolation par projection au sens L^2	224
4.3.3	L'interpolation de la métrique	229
4.4	L'accélération du processus d'adaptation	231
4.4.1	Le prédicteur en espace	234
4.4.2	Le prédicteur en temps	237
4.5	Quelques illustrations de problèmes à surface libre	240
4.5.1	Le problème de la rupture d'une colonne d'eau	241

4.5.2	L'instabilité de Rayleigh-Taylor	243
4.5.3	Une variante du problème de Laplace	245
4.5.4	Deux bulles soumises à la poussée d'Archimède	246
4.5.5	Le problème d'une gouttelette dans un écoulement cisailé	247
4.5.6	La chute d'une gouttelette	248
4.6	Conclusion	248
CONCLUSION		255
RÉFÉRENCES		261

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Les fonctions polynomiales de transition $v^{0,p}$ pour $p = 1, 2, \dots, 6$.	93
Tableau 2.2	Les fonctions polynomiales de transition $v^{m,p}$ pour $m = 2, 3, 4$ et $p = 0, 1, \dots, 3$.	94
Tableau 2.3	Ratios de convergence sur l'erreur du gradient en norme L^2 pour $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ , (cf. figure 2.13(c)).	133
Tableau 2.4	Ratios de convergence sur l'erreur du gradient en norme L^2 pour $\tilde{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ , (cf. figure 2.12(d)).	134
Tableau 2.5	Ratios de convergence sur l'erreur du gradient en norme L^2 pour $\bar{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ , (cf. figure 2.13(d)).	135
Tableau 2.6	Coefficients w_j obtenus pour les méthodes $\tilde{\nabla}_{N,q}^{1,r}$ et $\tilde{\nabla}_{N,t}^{1,r}$, la méthode $\bar{\nabla}_{N,q}^{1,r}$ et la méthode $\bar{\nabla}_{N,t}^{1,r}$	137
Tableau 2.7	Coefficients w_0, w_1, w_2 obtenus pour les opérateurs $\tilde{\nabla}_{N,q}^{1,r}$ et $\tilde{\nabla}_{N,t}^{1,r}$ sur le point $(-1, 0)$.	138
Tableau 2.8	Coefficients w_j obtenus pour les opérateurs $\tilde{\nabla}_{Z,q}^{1,r}, \bar{\nabla}_{N,q}^{1,r}, \bar{\nabla}_{N,t}^{1,r}$ sur le point $(-1, 0)$.	139
Tableau 2.9	Nombre de points, en fonction de r , définis sur l'élément de référence pour paramétrer le problème d'approximation lo- cale au sens des moindres carrés utilisant une décomposition SVD	139

Tableau 2.10	Ratios de convergence de l'erreur $\ n - n_h\ _2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_H (cf. figure 2.16(a)).	146
Tableau 2.11	Ratios de convergence de l'erreur $\ n - n_h\ _2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ (cf. figure 2.16(c))	146
Tableau 2.12	Ratios de convergence de l'erreur $\ n - n_h\ _2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ (cf. figure 2.16(d))	147
Tableau 2.13	Ratios de convergence de l'erreur $\ \kappa - \kappa_h\ _2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ (cf. figure 2.18(c))	152
Tableau 2.14	Ratios de convergence de l'erreur $\ \kappa - \kappa_h\ _2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ	152
Tableau 3.1	Paramètres de configuration du problème de la bulle oscillante	168
Tableau 3.2	Approximation par un cercle au sens des moindres carrés de l'isosurface de valeur nulle de $I_h^k(1.3 - \ \mathbf{x} - (-1, \frac{1}{2})\)$	200

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Quelques illustrations de problèmes à surface libre présents dans la nature (source Google Images)	7
Figure 1.2	Illustration de l'interface Γ pour un problème bifluide où les 2 fluides sont identifiés par les sous-domaines Ω_1 et Ω_2 du domaine Ω ayant pour frontière $\partial\Omega$	8
Figure 1.3	Interface Γ pour le problème \mathcal{P}_1 : cercle de centre c et de rayon r	16
Figure 1.4	Fonctions ϕ , H_ϵ et δ_Γ pour le problème \mathcal{P}_1	18
Figure 1.5	Exemple de triangulation du domaine Ω	27
Figure 1.6	Illustration de la transformation \mathcal{F}_K et des treillis quadratique et cubique associés à un triangle	28
Figure 1.7	Interpolant de Crouzeix-Raviart	34
Figure 1.8	Exemple de maillage 2D espace-temps construit par extrusion de 2 pas de temps	39
Figure 1.9	Schéma de résolution transitoire	42
Figure 1.10	Illustration de la renumérotation symbolique de la structure de la matrice globale issue de la méthode Galerkin discontinue : (a) structure de la matrice initiale (associée à la relation d'adjacence illustrée à la figure 1.11), (b) structure de la matrice renumérotée dans le sens de l'écoulement.	45

Figure 1.11	Relations d'adjacence des éléments dans le sens de l'écoulement pour un champ de vitesse uniforme $\mathbf{u} = (1, 0)$	46
Figure 1.12	Domaine Ω_ϵ pour la configuration illustrée à la figure 1.3 . . .	56
Figure 1.13	Illustration espace-temps de la diffusion de la zone de transition de la pseudo-concentration	62
Figure 1.14	Caractérisations du tenseur métrique	70
Figure 1.15	Illustration de l'intersection de métriques	75
Figure 1.16	Boucle d'adaptation de maillage stationnaire	78
Figure 1.17	Illustration de l'application de l'adaptation de maillage anisotrope sur un problème de Stokes : (c) isovaleurs du champ de vitesse \mathbf{u} sur le maillage adapté, (d) isovaleurs de la pression p sur le maillage adapté	79
Figure 1.18	Boucle d'adaptation de maillage transitoire	80
Figure 2.1	Graphes des régularisations de la fonction de Heaviside et des dérivées premières v' , secondes v'' et troisièmes v'''	92
Figure 2.2	Convergence de l'erreur du le calcul de l'aire (2.15) et sur le calcul de la longueur (2.16)	106
Figure 2.3	Illustration des ensembles \mathcal{B}_z^1 , \mathcal{B}_z^2 et \tilde{K}	109
Figure 2.4	Illustration des ensembles \mathcal{E}_{σ_0} et $\mathcal{E}_{\sigma_0}^w$ associé au sommet $\mathbf{z}_0 = \mathbf{0}$	118
Figure 2.5	Illustration de l'orientation barycentrique de $\mathcal{E}_{\sigma_0}^w$ associée au sommet de la cellule	119

Figure 2.6	Dépendance symbolique d'un degré de liberté j pour l'opérateur de quasi-interpolation de niveau $\ell = 1$	125
Figure 2.7	Cellule de type Union-Jack	126
Figure 2.8	Structure symbolique de la représentation matricielle de l'opérateur de quasi-interpolation	127
Figure 2.9	Pondération des valeurs nodales pour le calcul de $Q_h^{1,2}(I_h^1)$ au point milieu	128
Figure 2.10	Les deux maillages anisotropes utilisés pour effectuer les tests de convergence sur la normale et la courbure, \mathcal{T} est adapté par une métrique basée sur la quantité $\nabla^2(H_\epsilon)$ et \mathcal{T}_n est adapté par une métrique basée sur la quantité $\nabla^2(\nabla H_\epsilon \cdot \nabla H_\epsilon)$	131
Figure 2.11	Agrandissement sur un voisinage de l'interface des deux maillages anisotropes pour effectuer les tests de convergence sur la normale et la courbure.	132
Figure 2.12	Comparaison des erreurs d'approximation du gradient (2.59) pour les opérateurs $\bar{\nabla}_{N,t}$ et $\tilde{\nabla}_{N,q}$. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$	133
Figure 2.13	Comparaison des erreurs d'approximation du gradient pour les opérateurs $\bar{\nabla}_{N,t}$ et $\bar{\nabla}_{Z,t}$. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$	134
Figure 2.14	Pondération des valeurs nodales discontinues pour la première composante de $\tilde{\nabla}_{N,t}^{1,r}$ au point milieu	136

Figure 2.15	Illustration du calcul de la normale avec l'utilisation d'une régularisation $H_{\frac{1}{4}}^{4,3}$. La première colonne représente le graphe et la distribution des isovaleurs de la pseudo-concentration et la colonne de droite représente la norme de la normale et sa représentation vectorielle illustrant les inversions de signe.	144
Figure 2.16	Erreur d'approximation de la normale (2.59) à l'aide de l'approximation du gradient par reconstruction du développement de Taylor. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$	145
Figure 2.17	Illustration du filtre appliqué au calcul de la courbure d'une interface représentée par un cercle de centre $(\frac{1}{2}, \frac{3}{4})$ et de rayon $r = 0,15$. Nous avons fixé $\frac{1}{8}$, et nous utilisons l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$. Les figures représentent une coupe de la courbure réalisée sur l'axe $y = \frac{3}{4}$, ainsi que le graphe de la courbure pour $k = 4$ où l'échelle de couleur est comprise entre 6.4 et 6.8 . . .	149
Figure 2.18	Erreur d'approximation de la courbure (2.59) à l'aide de l'approximation du gradient par reconstruction du développement de Taylor. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$	151
FIG. 2.19	Configuration initiale du problème de Laplace.	153
Figure 2.20	Mesure des courants parasites pour le problème de Laplace, l'indice i correspond au niveau de raffinement utilisé ($h_i = 2^{-i}h, \Delta_i t = 2^{-i}\Delta t$)	154
Figure 2.21	Mesure de la dérivée en temps des courants parasites pour le problème de Laplace. L'indice i correspond au niveau de raffinement utilisé ($h_i = 2^{-i}h, \Delta_i t = 2^{-i}\Delta t$)	155

Figure 2.22	Mesure de l'erreur sur le saut de pression pour le problème de Laplace. L'indice i correspond au niveau de raffinement utilisé ($h_i = 2^{-i}h, \Delta_i t = 2^{-i}\Delta t$)	156
Figure 2.23	Coupe de la pression, selon l'axe $y = 0$, pour le problème de Laplace.	157
Figure 2.24	Mesures de l'intensité des courants parasites et de l'erreur sur le saut de pression pour le problème de Laplace en utilisant la méthodologie de calcul de la force volumique	157
Figure 3.1	Illustration espace-temps de la diffusion de Ω_ϵ . La diffusion s'accompagne d'une dépendance en temps du paramètre $\epsilon(t)$	163
Figure 3.2	Illustration des deux problèmes de référence pour vérifier la conservation de la quantité de volume : (a) interfaces du problème du « vortex-in-a-box » aux temps $t_0 = 0$, $t_1 = 0,6$ et $t_2 = 1,875$, (b) interfaces du problème du « disque de Zalesak » aux temps $t_0 = 0$, $t_1 = 12,5$ et $t_2 = 37,5$	167
Figure 3.3	Illustration de la diffusion du gradient pour le problème « vortex-in-box » aux temps $t_0 = 0$ et $t_1 = 0,6$. Le diamètre local de la zone de transition n'est plus uniforme le long de l'interface.	168
Figure 3.4	Configuration initiale du problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède	170
Figure 3.5	Localisation et discrétisation linéaire de l'isosurface $\frac{1}{2}$ d'une fonction de base de Lagrange de degré 4.	171

Figure 3.6	Les subdivisions (de niveau $\ell = 0$) associées aux treillis d'ordre k	172
FIG. 3.7	Paramétrisation de l'interface à l'aide d'une B-spline en se basant sur un polygone de contrôle formé par un carré. . . .	178
FIG. 3.8	Calcul des points limites et des tangentes associées de Γ_h^2 . .	180
FIG. 3.9	Coloration des fluides à l'aide de la discrétisation linéaire. Les normales calculées de la spline cubique sont aussi affichées.	182
Figure 3.10	Projection orthogonale de 3 points sur la courbe $\bar{\Gamma}_h$	184
Figure 3.11	Discrétisation sur le problème du « disque de Zalesak » . . .	185
Figure 3.12	Comparaison entre la paramétrisation linéaire et la paramétrisation de Γ_h^2 pour le problème du « disque de Zalesak » . .	186
Figure 3.13	Effet de la réinitialisation sur la distribution des isovaleurs de la pseudo-concentration pour le problème du « vortex-in-box » au temps $t = 0, 6$	189
Figure 3.14	Comparaison de la distribution des isovaleurs de la pseudo-concentration pour une réinitiation avec et sans paramétrisation B-splinaire pour le problème « vortex-in-box ».	190
Figure 3.15	La convergence de l'approximation de la fonction distance signée $I_h^k \phi_\Gamma - \phi_\Gamma$ pour le problème \mathcal{P}	190
Figure 3.16	Erreur d'approximation des distances signées $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\phi_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}	191

Figure 3.17	Erreur relative sur le calcul du volume du fluide pour le problème d'advection selon $u = (1, 0)$. Aucune réinitialisation n'est appliquée.	192
Figure 3.18	Erreur relative sur le calcul du volume du fluide pour le problème d'advection selon $u = (1, 0)$. n correspond à une réinitialisation tous les n pas de temps.	193
Figure 3.19	Convergence des gradients $\nabla\phi_\Gamma$ et $\nabla\phi_{\bar{\Gamma}}$ pour le problème \mathcal{P}	194
Figure 3.20	Convergence de la précision de la normale calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\phi_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}	195
Figure 3.21	Convergence de la précision de $\ \kappa - \kappa_h\ $ pour la courbure calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\phi_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}	196
Figure 3.22	Le maillage utilisé pour les expériences numériques du problème \mathcal{P}_1	198
Figure 3.23	Illustration de l'effet du filtre (3.17) sur la régularité de l'approximation de la courbure pour le problème \mathcal{P}_1 . Les isosurfaces visualisées sont isolées entre 3,8 et 4,2.	198
Figure 3.24	Convergence de la précision de $\ \mathbf{n} - \mathbf{n}_h\ $ pour la courbure calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\tilde{\phi}_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}_1	199
Figure 3.25	Convergence de la précision de $\ \kappa - \kappa_h\ $ pour la courbure calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\tilde{\phi}_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}_1	200
Figure 3.26	Illustration d'une formule de quadrature à 3 points, adaptée selon la surface libre.	202

Figure 4.1	La boucle d'adaptation de maillage transitoire.	206
Figure 4.2	Caractérisations du tenseur métrique	213
Figure 4.3	Métrique naturelle du maillage	217
Figure 4.4	Illustration de la triangulation de l'intersection d'un triangle avec un maillage.	225
Figure 4.5	Illustration de la construction de la triangulation de l'inter- section d'un triangle avec un maillage	226
Figure 4.6	Illustration la convergence du point fixe selon 3 méthodes d'interpolation, I_1 (évaluation ponctuelle), I_2 (projection lo- cale L^2 par intersection de maillage), I_2 (projection globale L^2 par intersection de maillage)	227
Figure 4.7	Illustration de la différence $\ F_{h,i+1}\ _2 - \ F_{h,i}\ _2$, I_1 (évalua- tion ponctuelle), I_2 (projection locale L^2 par intersection de maillage), I_3 (projection globale L^2 par intersection de maillage)	228
Figure 4.8	Illustration de deux schémas d'interpolation de métriques le long d'une arête	230
Figure 4.9	Le maillage \mathcal{T}^0 et l'interface Γ_0 définis au temps t_0 pour le problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique.	231

Figure 4.10	Le maillage \mathcal{T}^Δ et l'interface Γ_0 définis au temps t_0 pour le problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique.	232
Figure 4.11	Le maillage \mathcal{T}^Δ et l'interface Γ_1 définis au temps t_1 pour le problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique.	232
Figure 4.12	Modification de la boucle d'adaptation par l'insertion d'un prédicteur	235
Figure 4.13	Maillage \mathcal{T}^0 sans prédiction en espace pour le problème du « vortex-in-box »	236
Figure 4.14	Maillage \mathcal{T}^0 avec prédiction en espace sur la prochaine période de temps pour le problème du « vortex-in-box »	236
Figure 4.15	Mesure du point fixe en norme L^1 en fonction des itérations pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique	238
Figure 4.16	Mesure du point fixe en norme L^2 en fonction des itérations pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique	238
Figure 4.17	Mesure du point fixe en norme L^∞ en fonction des itérations pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique	238

Figure 4.18	Mesure du point fixe en norme L^1 en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique	239
Figure 4.19	Mesure du point fixe en norme L^2 en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique	239
Figure 4.20	Mesure du point fixe en norme L^∞ en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique	239
Figure 4.21	Illustration qualitative du problème de la rupture d'une colonne d'eau. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)	242
Figure 4.22	Illustration du problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en 2D. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)	244
Figure 4.23	Illustration du problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en coordonnées axisymétriques. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas) . . .	245
Figure 4.24	Illustration du problème de Laplace en partant d'un carré à différents instants (de haut en bas). La zone de transition de la pseudo-concentration est représentée à gauche et la norme du champ de vitesse est représentée à droite.	250

Figure 4.25	Illustration du problème de deux bulles de gaz dans un liquide soumises à la poussée d'Archimède. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)	251
Figure 4.26	Illustration du problème d'une gouttelette dans un écoulement cisailé. L'interface est représentée à différents instants (de haut en bas)	252
Figure 4.27	Illustration du problème de la chute d'une gouttelette dans un autre liquide. Chaque figure affiche (de gauche à droite) le maillage, le champ de vitesse et l'interface pour différents instants t (de haut en bas).	253
Figure 4.28	Illustration du problème de la chute d'une gouttelette dans un autre liquide. Chaque figure affiche (de gauche à droite) le maillage, le champ de vitesse et l'interface pour différents instants t (de haut en bas).	254

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ANN	Approximate Nearest Neighbors
BLAS	Basic Linear Algebra Subroutines
FIAT	Finite Integration Automatic Tabulator
IMR	Implicit Midpoint Rule
LAPACK	Linear Algebra Package
SUPG	Streamline Upwind Petrov Galerkin
OORT	Object Oriented Remeshing Toolkit

INTRODUCTION

La modélisation mathématique et la simulation numérique sont des outils pour étudier les résultats d'une action sur un élément sans réaliser l'expérience sur l'élément réel. Cette technologie est récente et est devenue abordable grâce à l'avènement et aux développements des ordinateurs. Cet outil est maintenant largement utilisé par le chercheur, l'ingénieur ou le militaire dans des domaines aussi variés que les sciences physiques, l'économie, ou la biologie, et permet de substituer une expérience virtuelle à une expérience réelle dans le cas où celle-ci est irréalisable, trop chère ou contraire à l'éthique.

L'objet de cette thèse est la modélisation et la simulation numérique des problèmes d'écoulements incompressibles avec surfaces libres. Ces problèmes sont rencontrés dans de nombreux domaines et notamment dans de nombreuses applications industrielles. La modélisation des problèmes à surface libre a pour but d'identifier les interfaces qui délimitent les fluides en écoulement, la dynamique de ces régions de contact ainsi que la physique interfaciale. En prenant l'illustration de la rupture d'un barrage hydro-électrique, la surface libre correspond à la région de l'espace qui délimite les zones inondées des zones non inondées, les deux fluides en présence étant l'eau et l'air. La simulation numérique d'une telle catastrophe répond à des préoccupations de sécurité. Cet objectif est également partagé par l'industrie nucléaire qui utilise de manière abondante la modélisation mathématique et la simulation numérique de ce type d'écoulements. On retrouve aussi de nombreux problèmes avec surfaces libres dans les procédés de fabrication des matériaux plastiques où on peut par exemple citer les procédés de moulage, de coextrusion ou d'émulsion. Ainsi la modélisation mathématique et la simulation numérique offrent aux industriels une méthode rentable pour accroître la valeur et la fiabilité de leurs produits tout en diminuant la dépendance sur les essais empiriques pour le réglage des outils de

fabrication afin de réduire les coûts liés aux matières premières. Intégrées dans le cycle de conception, ces techniques permettent des réductions tangibles de temps et de coûts de production tout en assurant une nette amélioration du produit final. Les logiciels de simulations numériques permettent de manière préalable d'éviter des défauts pouvant mener à un produit non utilisable, l'apparition de bulles d'air lors du moulage d'une pièce en plastique en est un exemple, et peuvent ainsi contribuer à l'amélioration des procédés de fabrication. Nous pouvons aussi prendre l'exemple de l'industrie pétrolière où la modélisation et la simulation numérique sont notamment utilisées dans une perspective de recherche et développement pour contribuer à l'amélioration des procédés d'extraction des hydrocarbures. Parmi les problèmes à surfaces libres rencontrés, l'extraction des hydrocarbures dans les sables bitumineux à l'aide de solvants ou encore l'extraction des nappes d'hydrocarbures dans les sous-sols par injection d'eau à haute pression peuvent être cités.

Dans cette thèse, nous nous intéressons à une catégorie de problèmes à surfaces libres qui inclut des phénomènes physiques principalement régis par la tension superficielle. La particularité de ce type de problèmes est qu'ils nécessitent une bonne modélisation de la physique à l'interface car ces phénomènes peuvent présenter des changements topologiques de la surface libre pouvant être importants et complexes. Les phénomènes physiques qui présentent des interactions de bulles est un exemple pertinent de problèmes appartenant à cette catégorie. C'est pourquoi nous nous intéressons dans cette thèse à ces derniers puisqu'ils réunissent un ensemble de caractéristiques qui doivent être maîtrisées pour développer et proposer une méthodologie de modélisation et de simulation la plus générale, la plus précise et la plus simple possible.

De façon succincte, les stratégies de modélisation des écoulements incompressibles avec surfaces libres se classent en deux catégories : les approches dites lagrangiennes et les approches dites eulériennes. D'un point de vue simplifié, les approches la-

grangiennes s'assimilent à des méthodes qui modélisent les surfaces libres par des particules, avec ou sans connectivité, qui sont transportées par l'écoulement. Ces méthodes sont très précises mais présentent des limitations lorsque celles-ci sont appliquées pour résoudre des problèmes comprenant des changements de topologie, augmentant ainsi de façon considérable la complexité des algorithmes pour adapter ces méthodes à ce type de problèmes. Les méthodes eulériennes sont des méthodes où la surface libre est capturée, par opposition au suivi de l'interface qui caractérise les méthodes lagrangiennes. Les méthodes de lignes de niveaux, incluant la méthode de la pseudo-concentration, s'avèrent beaucoup plus simples et d'applications plus générales, incluant les changements de topologie, mais s'accompagnent d'une perte de précision si la méthodologie numérique n'est pas correctement élaborée. Pour obtenir des simulations numériques précises, les approches eulériennes nécessitent une résolution adéquate du maillage à l'interface pour devenir compétitives et pallier leur manque de précision. L'adaptation de maillage offre alors une stratégie de modélisation numérique incontournable qui doit être associée aux méthodes eulériennes, permettant ainsi de contrôler la complexité des algorithmes tout en conservant la simplicité et la généralité des approches eulériennes.

Pour sa flexibilité, notre choix se porte sur la méthode des éléments finis et plus particulièrement sur les méthodes d'éléments finis adaptatives, car celles-ci offrent un procédé d'optimisation de la discrétisation permettant d'améliorer la précision des résultats tout en réduisant les coûts de calculs. Une méthode d'éléments finis adaptative est un processus qui consiste à coordonner la résolution numérique des équations, l'estimation des erreurs de cette résolution, et l'adaptation du maillage servant de support à cette résolution. Tant que l'erreur estimée n'est pas satisfaisante, les équations sont résolues sur un nouveau maillage que nous voulons meilleur que le précédent grâce aux modifications apportées en fonction des estimateurs d'erreurs qui permettent d'indiquer une meilleure résolution de la discrétisation spatiale

là où cela s'avère nécessaire.

L'utilisation des estimateurs d'erreurs est un élément incontournable pour offrir une stratégie optimale d'adaptativité de maillage. C'est une composante maîtresse qui mène à la construction d'indicateurs d'erreurs censés être une bonne représentation de l'erreur entre la solution approximée et la solution exacte dans tout le domaine ; raffiner le maillage là où cette erreur est élevée permet soit d'améliorer, à coût égal, la précision de l'approximation soit de réduire le coût du calcul pour une précision donnée. C'est une composante essentielle des méthodes d'éléments finis adaptatives car les estimateurs d'erreurs sont des critères de décision permettant d'automatiser ces méthodes, c'est-à-dire de permettre l'arrêt du processus d'adaptativité si la précision requise est atteinte. La qualité des indicateurs d'erreur a une influence directe sur la qualité du maillage adapté et a fortiori sur l'ensemble de la simulation numérique du problème considéré.

La méthode de la pseudo-concentration s'inclut dans une classe de méthodes eulériennes qui modélisent la surface libre comme une ligne de niveau et qui requièrent la résolution d'une équation de transport. Cette équation permet de caractériser l'interface et son évolution, et intervient directement dans la modélisation de la physique à l'interface, c'est-à-dire des forces résultantes de la tension superficielle. Le contrôle des erreurs de discrétisation de cette équation est un aspect très important, et pour répondre à cette exigence nous nous concentrons essentiellement sur une stratégie d'estimation d'erreurs dédiée à l'équation de transport.

Notre but est de développer une stratégie d'adaptation de maillage pour la simulation numérique des écoulements incompressibles incluant des surfaces libres. L'approche que nous proposons pour la simulation numérique de tels phénomènes a pour objectif de s'inscrire dans une méthodologie la plus simple et générale possible. Notre but est d'offrir une méthodologie numérique qui se distingue par la qualité de ses estimateurs d'erreurs et de ses critères adaptatifs, tout en ayant la

capacité de modéliser des écoulements à surfaces libres de nature diverse.

Objectifs

L'objectif principal de cette thèse est de développer une méthodologie d'adaptation de maillage pour traiter les problèmes d'écoulements incompressibles avec surfaces libres, qu'ils soient stationnaires ou transitoires. Quatre objectifs plus spécifiques sont identifiés pour atteindre cet objectif :

1. Développer une stratégie pour modéliser numériquement la force capillaire par l'intermédiaire des calculs des normales et des courbures aux interfaces ;
2. Développer un ensemble de techniques numériques dans le but de s'assurer de la conservation des propriétés physiques des fluides présents dans un écoulement multifluide ;
3. Développer une stratégie d'adaptation de maillage spécifique aux problèmes à surfaces libres, en portant une attention particulière pour les problèmes transitoires ;
4. Vérifier et valider la méthodologie développée à l'aide d'un ensemble représentatif d'écoulements incompressibles avec surfaces libres qui présentent des changements topologiques.

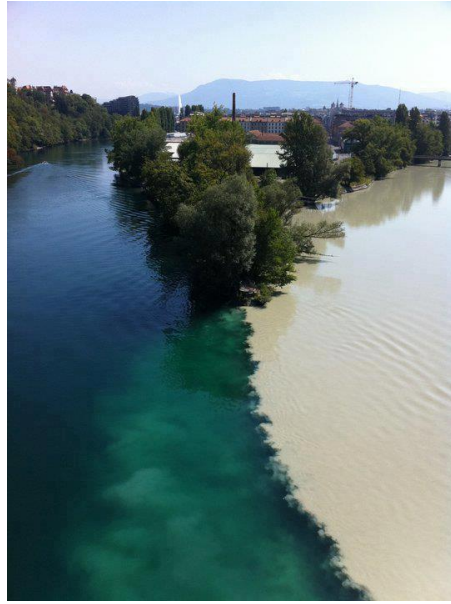
La thèse est structurée de la façon suivante. Le premier chapitre contient une description du cadre de travail avec une revue de la bibliographie. Chacun des chapitres suivants est consacré à un des objectifs que nous venons d'énumérer.

CHAPITRE 1

LA MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS À SURFACES LIBRES

Une surface libre, ou interface, est le lieu de contact entre des milieux qui sont soit de phases différentes (liquide-gaz), soit de même phase mais possédant des propriétés différentes (liquide-liquide, gaz-gaz). Seules les interfaces liquide-liquide et liquide-gaz sont l'objet de ce cadre de recherche. Quelques illustrations sont présentées à la figure 1.1.

Ce chapitre a pour objectif d'introduire l'ensemble des thèmes que nous abordons dans cette thèse. Après la description des équations impliquées dans la modélisation des écoulements incompressibles à surfaces libres, nous présentons les méthodes de discrétisation qui sont utilisées pour approximer numériquement les solutions du problème. Ensuite, nous introduisons les concepts de base relatifs aux estimateurs d'erreurs a priori et a posteriori ainsi que les techniques d'adaptation de maillage dont nous nous servons pour fournir des critères de qualité des simulations numériques choisies. Nous nous limitons à des problèmes formulés en deux dimensions. Pour la suite, les besoins spécifiques au cas axisymétrique seront mentionnés lorsque nécessaire. Ainsi, sans perte de généralité, nous considérons un domaine fermé $\Omega \in \mathbb{R}^2$ de frontière $\partial\Omega$, exprimé comme $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ où chacun des sous-ensembles fermés Ω_i , pas nécessairement connexes, s'identifie à un fluide et où l'interface entre les fluides 1 et 2 est définie par $\Gamma = \Omega_1 \cap \Omega_2$ (cf. figure 1.2).



(a) collision entre le Rhône et l'Arve à Genève



(b) la dynamique des bulles d'air



(c) pollution pétrolière à Queen Bess Island, le 8 juin 2010



(d) la dynamique des gouttelettes

Figure 1.1: Quelques illustrations de problèmes à surface libre présents dans la nature (source Google Images)

1.1 Les équations

On retrouve la description des équations de conservation de l'écoulement d'un fluide dans plusieurs ouvrages consacrés à la mécanique des fluides. Pour les écoulements multiphasés, mentionnons entre autres les livres de Middleman (1995) et de Sadhal *et al.* (1997).

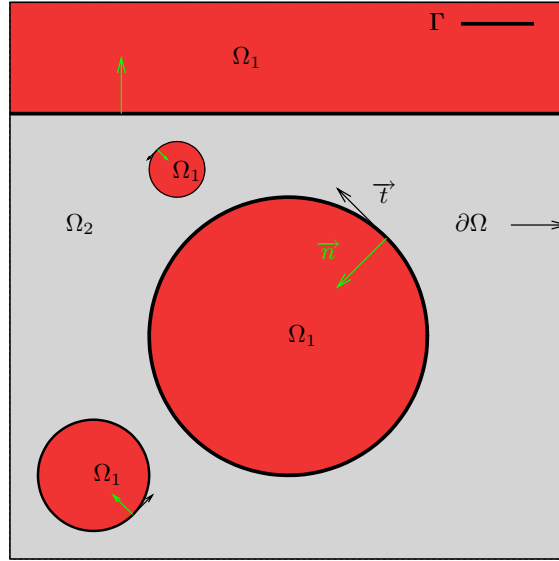


Figure 1.2: Illustration de l'interface Γ pour un problème bifluide où les 2 fluides sont identifiés par les sous-domaines Ω_1 et Ω_2 du domaine Ω ayant pour frontière $\partial\Omega$.

1.1.1 Les équations de Navier-Stokes

La modélisation des écoulements incompressibles avec surfaces libres nécessite pour chaque fluide la résolution de l'équation de conservation de la masse et de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. L'équation de conservation de l'énergie n'est présente que si l'écoulement est considéré thermodépendant, ce qui ne sera pas le cas ici. Mentionnons que nous n'étudierons que les fluides dits « newtoniens », i.e. les fluides qui présentent une viscosité constante.

L'indice $i \in 1, 2$ désigne le i^{e} fluide occupant le sous-domaine Ω_i , et pour chacun de ces fluides, on note \mathbf{u}_i le champ de vitesse, p_i la pression et ρ_i la densité. Pour un écoulement incompressible (Chorin et Marsden (1979)), l'équation de conservation de la masse est donnée par

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = 0. \quad (1.1)$$

Lorsque les variations de la densité pour chaque fluide peuvent être négligées, l'équation de conservation de la quantité de mouvement fait intervenir le tenseur de contraintes, aussi dénommé tenseur de Cauchy,

$$\boldsymbol{\sigma}_i = -p_i \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_i, \quad (1.2)$$

où \mathbf{I} est le tenseur identité et $\boldsymbol{\tau}_i$ est le tenseur des contraintes visqueuses qui s'écrit

$$\boldsymbol{\tau}_i = 2\mu_i \dot{\boldsymbol{\gamma}}_i(\mathbf{u}_i),$$

et qui est fonction du champ de vitesse \mathbf{u}_i et de la viscosité μ_i . Le tenseur vitesse-de-déformation $\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i(\mathbf{u}_i)$ est défini par

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}_i(\mathbf{u}_i) = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u}_i + (\nabla \mathbf{u}_i)^t \right).$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit

$$\rho_i \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + \rho_i (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}_i = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i + \rho_i \mathbf{g} \quad (1.3)$$

où \mathbf{g} est la force gravitationnelle. Les variables dépendantes de ce système d'équations aux dérivées partielles sont les vitesses \mathbf{u}_i et les pressions p_i .

On décompose la frontière du domaine comme $\partial\Omega = \partial\Omega_{D,\mathbf{u}} \cup \partial\Omega_{N,\mathbf{u}}$, où $\partial\Omega_{D,\mathbf{u}}$ est la partie de la frontière où les conditions de Dirichlet sont appliquées (utilisation de l'indice 'D')

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_{D,\mathbf{u}}, \quad (1.4)$$

et les conditions de Neumann sont appliquées sur $\partial\Omega_{N,\mathbf{u}}$ (utilisation de l'indice

'N'),

$$\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}_{N,\mathbf{u}},$$

où $\mathbf{t}_{N,\mathbf{u}}$ est un vecteur de traction.

On se positionne dans le fluide 2 et on note $(\mathbf{n}_\Gamma, \mathbf{t}_\Gamma)$ le repère de Fresnet d'une particule appartenant à l'interface Γ , où \mathbf{n}_Γ désigne la normale à Γ orientée vers le fluide 1 et \mathbf{t}_Γ désigne la tangente (cf. figure 1.2). La courbure de la surface libre est notée κ_Γ . Pour compléter le système d'équations ci-dessus, un ensemble de conditions de continuité doivent être satisfaites sur l'interface Γ . Ces conditions sont la continuité de la vitesse normale

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_\Gamma, \quad (1.5)$$

la continuité de la vitesse tangentielle

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{t}_\Gamma = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{t}_\Gamma \quad (1.6)$$

et l'équilibre des forces impliquant la tension superficielle (Batchelor (1967))

$$(\boldsymbol{\sigma}_2 - \boldsymbol{\sigma}_1) \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \alpha \kappa_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma, \quad (1.7)$$

dont α est le coefficient. Les écoulements de fluides étudiés dans cette thèse étant considérés non miscibles, la condition à l'interface (1.5) peut être interprétée dans le cas d'un écoulement stationnaire (Leborgne (1992)), comme une condition d'immiscibilité entre deux fluides :

$$\mathbf{u}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_\Gamma = 0. \quad (1.8)$$

Si on écrit l'équation de conservation (1.3) sous forme intégrale, nous obtenons pour chacun des fluides

$$\int_{\Omega_i} \left(\rho_i \frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i - \rho_i \mathbf{g} \right) d\Omega = 0, \quad (1.9)$$

où nous avons introduit la dérivée matérielle $\frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + (\mathbf{u}_i \cdot \nabla) \mathbf{u}_i$.

En appliquant le théorème de la divergence, nous avons

$$\int_{\Omega_i} \left(\rho_i \frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} - \rho_i \mathbf{g} \right) d\Omega = \left(\int_{\partial\Omega_i} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} + \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{n}_i \right) ds, \quad (1.10)$$

avec \mathbf{n}_i étant la normale à la surface libre dans la direction extérieure du fluide i .

En sommant nous obtenons

$$\int_{\Omega} \left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho \mathbf{g} \right) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} ds + \int_{\Gamma} (\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{n}_{\Gamma} ds, \quad (1.11)$$

et avec l'équilibre des forces (1.7) ainsi que l'application du théorème de la divergence, la précédente relation devient

$$\int_{\Omega} \left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho \mathbf{g} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} d\Omega + \int_{\Gamma} \alpha \kappa \mathbf{n}_{\Gamma} ds. \quad (1.12)$$

L'intégrale de surface incluant la tension superficielle peut être remplacée par une intégrale de volume avec l'introduction de la fonction de Dirac à l'interface

$$\int_{\Gamma} \alpha \kappa \mathbf{n}_{\Gamma} ds = \int_{\Omega} \alpha \kappa_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} \delta_{\Gamma} d\Omega, \quad (1.13)$$

où

$$\delta_{\Gamma}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma; \\ 0, & \text{si } \mathbf{x} \notin \Gamma. \end{cases}$$

Ceci nous permet de retirer la forme intégrale de l'équation (1.12) :

$$\left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \rho \mathbf{g} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_\Gamma, \quad (1.14)$$

avec $\mathbf{f}_\Gamma = \alpha \kappa \mathbf{n}_\Gamma \delta_\Gamma$.

L'approche eulérienne que nous utilisons nous permet de résoudre un seul système d'équations grâce à l'introduction d'une variable supplémentaire F comme étant une représentation de la configuration topologique des fluides en présence :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(F) \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mathbf{g} \right) &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(F) + \mathbf{f}_\Gamma(F); \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0; \\ \mathbf{u}|_{\partial\Omega_D, \mathbf{u}} &= \mathbf{u}_{D, \mathbf{u}}; \\ \boldsymbol{\sigma}|_{\partial\Omega_N, \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega_N, \mathbf{u}} &= \mathbf{t}_{N, \mathbf{u}}. \end{array} \right. \quad (1.15)$$

Si on veut appliquer des conditions de glissement sur une partie de la frontière $\partial\Omega_{D, \mathbf{u}} \subset \partial\Omega$, alors il faut imposer une condition de Dirichlet sur la composante normale de la vitesse

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega_S, \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0, \quad (1.16)$$

et le vecteur de traction imposé sur la condition de Neumann doit vérifier

$$\mathbf{t}|_{\partial\Omega_S, \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad (1.17)$$

si on veut inclure un frottement à la paroi (Engelman *et al.* (1982), Behr (2004)).

Sous forme résiduelle, le système d'équations s'écrit

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}, p) = \mathbf{0} = \begin{pmatrix} \mathcal{L}\mathbf{u} \\ \mathcal{L}_p \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

avec

$$\begin{cases} \mathcal{L}\mathbf{u} &= \rho(F) \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mathbf{g} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}_\Gamma(F); \\ \mathcal{L}_p &= \nabla \cdot \mathbf{u}. \end{cases}$$

1.1.2 La modélisation de la dynamique des surfaces libres

Les stratégies de modélisation des surfaces libres se classent principalement en deux catégories que sont les méthodes lagrangiennes et les méthodes eulériennes, sans oublier les méthodes qui couplent ces deux approches.

L'approche lagrangienne

Parmi les approches lagrangiennes on retrouve principalement les méthodes particulières et les méthodes d'avancées de front dites « front tracking » (Unverdi et Tryggvason (1992)). Ces approches se caractérisent par le transport du maillage avec la surface libre. Les noeuds sont considérés comme des particules alignées sur l'interface, puis transportées par l'écoulement qui est calculé sur le maillage lagrangien. Les points du maillage deviennent essentiellement des particules \mathbf{x}_k qui se déplacent en coordonnées eulériennes, mais qui sont constantes en coordonnées lagrangiennes. Cette stratégie possède l'avantage de pouvoir facilement imposer des conditions à l'interface, telle que la tension superficielle, et permet une représentation très précise de la surface libre lorsque celle-ci est soumise à de petites déformations.

Lorsque la déformation de la surface libre devient trop importante, pour de hauts nombres de Reynolds ou pour des géométries complexes, le transport du maillage peut s'avérer difficile, violant ainsi les conditions de régularité des éléments et pouvant même donner naissance à des éléments dégénérés. La distorsion des éléments provoque une importante perte de précision et peut éventuellement mener à une connectivité invalide du maillage. La difficulté de traitement des changements topologiques de la surface libre, tels que la coalescence ou les ruptures, est un des désavantages des approches lagrangiennes. Des considérations spécifiques et heuristiques doivent être mises en œuvre dans le but d'effectuer une redistribution des particules. Dans le cas où ces particules ne sont pas connectées entre elles, par opposition à l'approche « front tracking », le respect des topologies devient difficile. Par ailleurs, l'interaction de ces méthodes avec des maillages fixes (i.e. eulériens) peut s'avérer compliquée. Pour ces quelques raisons non exhaustives, les codes de calculs utilisant cette approche sont difficiles à implémenter puisque la complexité des problèmes implique la complexité des algorithmes.

L'approche eulérienne

Avec une approche eulérienne, l'interface est capturée sur un maillage fixe par l'intermédiaire d'une variable de marquage que nous avons notée F et qui est introduite pour identifier chaque sous-domaine Ω_i . Cette variable est transportée par le champ de vitesse de chacun des fluides par la résolution d'une équation de transport

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla F = 0, \quad (1.19)$$

où on aura pris soin de définir les conditions limites et initiales du problème considéré. Pour cela on introduit le domaine $\partial\Omega_{D,F} \subset \partial\Omega$ où les conditions de Dirichlet sont appliquées.

On introduit la dérivée matérielle $\frac{DF}{Dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F$ et le système d'équations à discrétiser devient :

$$\mathcal{L}(F, \mathbf{u}, p) = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_F \\ \mathcal{L}_{\mathbf{u}} \\ \mathcal{L}_p \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (1.20)$$

avec

$$\mathcal{L}_F = \frac{DF}{Dt}.$$

L'avantage de cette approche réside dans sa simplicité pour traiter des problèmes comprenant un grand nombre d'interfaces, car contrairement aux méthodes lagrangiennes, la complexité des interfaces n'implique pas la complexité des algorithmes. Elle est donc mieux adaptée pour modéliser l'évolution d'une surface libre soumise à de grandes déformations, ou encore à des changements topologiques importants tels que les ruptures ou les coalescences. L'inconvénient majeur de l'approche eulérienne est son manque de précision si les méthodes numériques ne sont pas convenablement choisies, ou si le maillage est trop grossier. Les conditions de continuité à l'interface (1.5), (1.6) et (1.7) sont satisfaites de façon implicite, et pour obtenir une bonne modélisation de la dynamique des surfaces libres il faut s'assurer que ces contraintes sont vérifiées lors de la discrétisation numérique des équations.

Avec une approche eulérienne, on retrouve principalement deux types de méthodes : les méthodes de fractions de volumes et les méthodes de lignes de niveau. Les méthodes des lignes de niveau, ou méthodes dites « level-set » (Osher et Sethian (1988), Sethian (1999), Osher et Fedkiw (2003), Sussman *et al.* (1998), Smereka et Osher

(1994)), utilisent une variable de marquage qui définit implicitement l'interface par une ligne de niveau spécifique. La représentation discrète Γ_h de l'interface Γ est complètement implicite, c'est-à-dire que celle-ci n'est pas représentée explicitement par le maillage par opposition aux méthodes lagrangiennes.

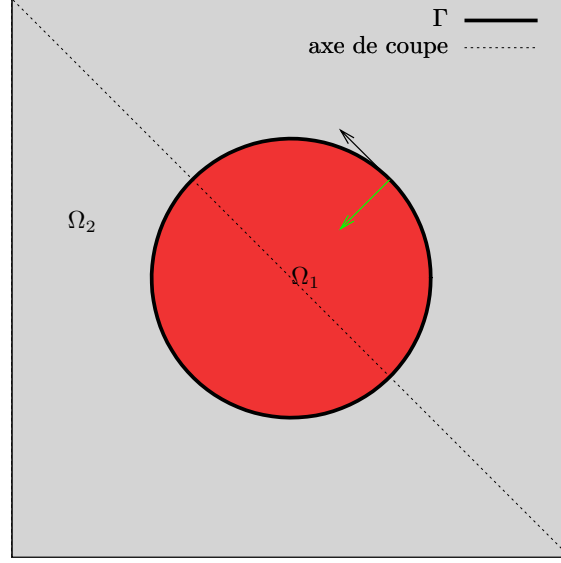


Figure 1.3: Interface Γ pour le problème \mathcal{P}_1 : cercle de centre c et de rayon r

Ces méthodes utilisent la distance euclidienne à l'interface Γ , notée d_Γ et définie $\forall \mathbf{x} \in \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ par

$$d_\Gamma(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{y} \in \Gamma} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

Cette distance est ensuite signée pour obtenir une fonction ϕ qui identifie chacun des deux fluides par son signe :

$$F(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} -d_\Gamma(\mathbf{x}), & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1; \\ d_\Gamma(\mathbf{x}), & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2. \end{cases} \quad (1.21)$$

La représentation implicite de l'interface correspond à la ligne de niveau (isosurface

en dimension 3) de valeur nulle de ϕ :

$$\Gamma = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid \phi(\mathbf{x}) = 0\}.$$

Notons que signer la distance euclidienne permet d'obtenir une variable eulérienne différentiable sur l'interface Γ . À titre d'illustration, nous prenons un exemple de problème biphasé, noté \mathcal{P}_1 , qui dans un domaine $\Omega = [-1, 1]^2$, inclut une interface Γ représentée par un cercle centré à l'origine et de rayon r (cf. figure 1.3). L'interface est implicitement définie par la distance euclidienne signée

$$\phi(\mathbf{x}) = r - \|\mathbf{x}\|,$$

de telle sorte que $\phi(\mathbf{x}) > 0$ pour $\mathbf{x} \in \Omega_1$, et $\phi(\mathbf{x}) < 0$ pour $\mathbf{x} \in \Omega_2$ (cf. figure 1.4(a)).

En se basant sur ϕ , on introduit la fonction de Heaviside :

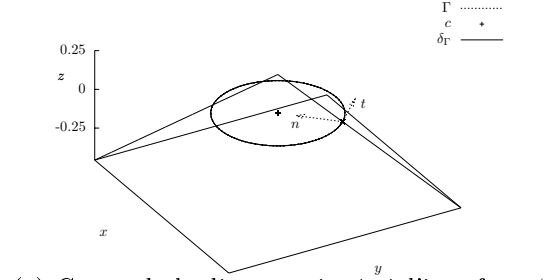
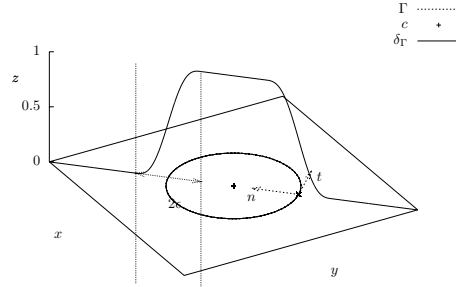
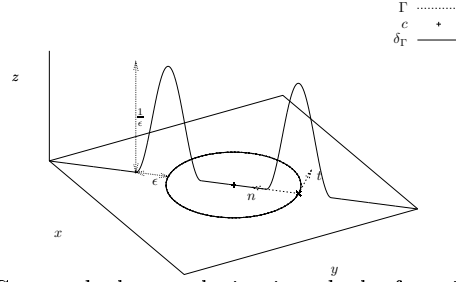
$$H(\phi) = \begin{cases} 0, & \phi < 0; \\ \frac{1}{2}, & \phi = 0; \\ 1, & \phi > 0. \end{cases} \quad (1.22)$$

Cette fonction permet de donner une représentation sur tout le domaine Ω des différents paramètres physiques (discontinus) impliqués dans les équations décrites à la section précédente, i.e. la viscosité et la densité :

$$\mu(\phi(\mathbf{x})) = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)H(\phi(\mathbf{x})), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega; \quad (1.23)$$

$$\rho(\phi(\mathbf{x})) = \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)H(\phi(\mathbf{x})), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (1.24)$$

En pratique, la fonction de Heaviside H peut être remplacée par une fonction de Heaviside régularisée H_ϵ (cf. figure 1.4(b)) et la fonction de Dirac δ_Γ peut

(a) Coupe de la distance signée à l'interface ϕ (b) Coupe de la régularisation de la fonction de Heaviside H_ϵ (c) Coupe de la régularisation de la fonction de Dirac δ_ϵ Figure 1.4: Fonctions ϕ , H_ϵ et δ_Γ pour le problème \mathcal{P}_1

être remplacée par une fonction de Dirac régularisée δ_ϵ (cf. figure 1.4(c)). Cette régularisation est abordée au second chapitre de cette thèse. Finalement, la normale à l'interface, orientée vers Ω_1 , est déterminée par

$$\mathbf{n}_\Gamma = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|}, \quad (1.25)$$

et la courbure est donnée par

$$k_\Gamma = -\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma. \quad (1.26)$$

Le lecteur trouvera une justification de ces deux dernières relations dans Béliveau *et al.* (1998). Avec cette approche, le système d'équations devient :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_F(\phi, \mathbf{u}) & = 0; \\ \mathcal{L}_{\mathbf{u}}(\phi, \mathbf{u}, p) & = 0; \\ \mathcal{L}_p(\mathbf{u}) & = 0; \\ \mu(\phi) & = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)H_\epsilon(\phi); \\ \rho(\phi) & = \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)H_\epsilon(\phi); \\ \mathbf{f}_\Gamma(\phi) & = -\alpha\delta_\epsilon(\phi)\nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} \right); \\ \mathbf{u}|_{\partial\Omega_D, \mathbf{u}} & = \mathbf{u}_{D, \mathbf{u}}; \\ \boldsymbol{\sigma}|_{\partial\Omega_N, \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega_N, \mathbf{u}} & = \mathbf{t}_{N, \mathbf{u}}; \\ \phi|_{\partial\Omega_{D, F}} & = \phi_{D, F}. \end{array} \right.$$

Le talon d'Achille des méthodes qui utilisent une fonction distance comme variable eulérienne, i.e. $F = \phi$, est de maintenir les propriétés géométriques de cette dernière lorsque les interfaces se déplacent. Numériquement, la relation

$$\|\nabla\phi\| = 1 \tag{1.27}$$

n'est plus respectée. Cette faiblesse des méthodes « level-set » s'exprime notamment par des fluctuations notables de la masse (Tornberg et Engquist (2000), Fedkiw *et al.* (2002)).

La variable eulérienne est solution de l'équation de transport (1.19), et quelle que soit la méthode pour résoudre cette équation, la variable discrétisée est affectée par de la diffusion numérique inhérente. Soit un processus de correction, ou de réinitialisation, doit être appliqué pour retrouver les propriétés d'une fonction distance, soit l'équation d'advection doit être modifiée pour s'assurer de la conservation de ces propriétés; les schémas d'advection tels que les schémas « Essentially Non-

Oscillatory » (ENO) et « Weighted Essentially Non-Oscillatory » (WENO) s'inscrivent dans cette dernière catégorie de méthodes.

Les méthodes « level-set » possèdent :

- l'avantage d'être précises pour calculer la normale et la courbure nécessaires pour appliquer la tension superficielle ;
- le désavantage d'être peu précises pour conserver la masse de chacun des fluides.

Les méthodes de fractions de volumes (Noh et Woodward (1976), Rudman (1997), Scardovelli et Zaleski (1999)), dites « volume-of-fluid » (VOF), utilisent une fonction de concentration constante par élément et qui est définie par la quantité de fluide présente dans chacun des éléments K du maillage,

$$F_i(K) = \frac{\int_K H(\Omega_i) dK}{|K|},$$

où H est la fonction de Heaviside associée au domaine Ω_i . Sur un élément, la variable de marquage est une projection constante au sens L^2 de la fonction de Heaviside $F = H$. L'interface n'est plus représentée de façon implicite, c'est-à-dire qu'un traitement « a posteriori » s'impose dans le cas où il est nécessaire de posséder une représentation (implicite ou explicite) de l'interface. Ce traitement n'est pas un calcul simple et toute une méthodologie est nécessaire pour s'assurer de reconstruire des interfaces topologiquement correctes (Owen *et al.* (2012)). Les méthodes VOF sont conçues de façon à ce que les quantités physiques soient exactement conservées lors du déplacement de chacun des fluides. Cependant ces dernières sont connues pour être peu précises, dans le sens où des schémas d'advection possédant un ordre de convergence supérieur à 2 ne sont pas disponibles (Olsson et Kreiss (2005)).

Les méthodes VOF possèdent :

- l'avantage de conserver exactement la masse de chacun des fluides ;
- le désavantage d'être peu précises pour calculer la normale et la courbure néces-

saies pour appliquer la tension superficielle.

Des méthodes hybrides furent développées pour utiliser les qualités de chacune de ces deux méthodes (Sussman et Puckett (2000), Fedkiw *et al.* (2002)), à savoir le caractère conservatif des méthodes VOF et la précision du calcul de la normale et de la courbure assurée par les méthodes « level-set ». Mais la simplicité des méthodes eulériennes est perdue.

La méthode de la pseudo-concentration utilise une régularisation H_ϵ de la fonction de Heaviside $F = H$ (cf. équation (1.22)) comme variable de marquage. C'est une méthode qui peut être assimilée à une méthode « level-set » pour certains choix de régularisation H_ϵ qui assurent un changement de distance. La surface libre est aussi implicitement définie, mais par la ligne de niveau correspondant à la valeur $\frac{1}{2}$ de H_ϵ . Cependant la diffusion numérique ne peut être contrôlée avec l'approche utilisée par les méthodes « level-set » et c'est le principal élément qui distingue la méthode de la pseudo-concentration de cette classe de méthodes. D'un autre côté, la méthode de la pseudo-concentration peut aussi être considérée comme une méthode VOF régularisée utilisant des projections sur des espaces polynomiaux de plus haut degré, mais elle ne possède pas le caractère conservatif absolu des méthode VOF.

Pour la méthode de la pseudo-concentration, le système d'équations à résoudre

devient alors :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_{H_\epsilon}(H_\epsilon, \mathbf{u}) & = 0; \\ \mathcal{L}\mathbf{u}(H_\epsilon, \mathbf{u}, p) & = 0; \\ \mathcal{L}_p(\mathbf{u}) & = 0; \\ \mu(H_\epsilon) & = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)H_\epsilon; \\ \rho(H_\epsilon) & = \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)H_\epsilon; \\ \mathbf{f}_\Gamma(H_\epsilon) & = -\alpha \nabla H_\epsilon \nabla \cdot \left(\frac{\nabla H_\epsilon}{\|\nabla H_\epsilon\|} \right); \\ \mathbf{u}|_{\partial\Omega_D, \mathbf{u}} & = \mathbf{u}_{D, \mathbf{u}}; \\ \boldsymbol{\sigma}|_{\partial\Omega_N, \mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega_N, \mathbf{u}} & = \mathbf{t}_{N, \mathbf{u}}; \\ H_\epsilon|_{\partial\Omega_{D, F}} & = H_{D, F}. \end{array} \right.$$

1.1.3 Adimensionnalisation des équations de Navier-Stokes

L'adimensionnalisation des équations s'avère utile pour simuler des écoulements en fonction d'une classification des nombres sans dimension. L'adimensionnalisation permet de faciliter la mise à l'échelle des résultats, d'éviter les problèmes d'erreurs d'arrondis qui apparaissent lorsque des échelles très différentes sont utilisées, et de déterminer l'importance relative de chacun des termes, ceci pouvant mener à des simplifications par omission des termes pouvant être négligés (exemple : modèle de Boussinesq). Chacune des variables est adimensionnalisée de façon à ce que les équations soient dépourvues d'unité. On utilise les variables sans dimension

suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \tilde{\mathbf{x}} & = & L\mathbf{x}; \\ \tilde{\mathbf{u}} & = & U_0\mathbf{u}; \\ \tilde{t} & = & t_0t; \\ \tilde{p} & = & \rho_\ell U_0^2 p; \\ \tilde{\rho} & = & \rho_\ell \rho; \\ \tilde{\mu} & = & \mu_\ell \mu, \end{array} \right. \quad (1.28)$$

où U_0 est la norme du champ de vitesse de référence et L est la longueur de référence du domaine.

En remplaçant ces variables dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, nous obtenons

$$\tilde{\rho} \left(\frac{1}{St} \tilde{\partial}_t \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}} \right) - \frac{1}{Re} \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{We} \tilde{\mathbf{f}}_V + \frac{\tilde{g}}{Fr} = 0, \quad (1.29)$$

où apparaissent le nombre de Strouhal St , le nombre de Reynolds Re , le nombre de Froude Fr ainsi que le nombre de Weber We :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} St & = & \frac{t_0 U_0}{L}; \\ Re & = & \frac{\rho_\ell L U_0}{\mu_\ell}; \\ Fr & = & \frac{U_0^2}{gL}; \\ We & = & \frac{\rho_\ell L U_0^2}{\alpha}. \end{array} \right. \quad (1.30)$$

Mentionnons deux autres nombres adimensionnels dont nous nous servons dans cette thèse : le nombre de Laplace

$$La = \frac{\alpha \rho_\ell \kappa_\Gamma}{\mu_\ell^2} = \frac{Re^2}{We}, \quad (1.31)$$

et le nombre de Bond

$$Bo = \frac{\rho_\ell g L^2}{\alpha} = \frac{We}{Fr}. \quad (1.32)$$

Par soucis de clarté, les annotations « \sim » sont omises pour la suite. La principale difficulté présente dans l'adimensionnalisation est le choix de la vitesse de référence U_0 , surtout si toutes les conditions de Dirichlet en vitesse sont nulles (il n'y a pas de vitesse cinématique évidente).

1.2 La discrétisation des équations

Plusieurs méthodes de discrétisation des équations de Navier-Stokes s'offrent à nous, et nous pouvons entre autres mentionner les méthodes de type différences-finies, les méthodes de type volumes-finis et les méthodes de type éléments-finis. Chacune de ces méthodes possède des avantages et des inconvénients selon le type de problème considéré. Une brève discussion s'ensuit sur les deux derniers types de méthodes. Nous abordons dans cette thèse des écoulements considérés incompressibles et nous allons décrire brièvement pourquoi la méthode des éléments finis, que nous utilisons dans ce travail, est mieux adaptée pour résoudre ce type de problème. Le lecteur pourra se référer à l'ouvrage écrit par Gresho et Sani (1998) dont un résumé sur la question suit.

La méthode des éléments finis est construite sur des théories mathématiques solides et attire ainsi la faveur des mathématiciens pour la rigueur des développements. Ce fondement mathématique reste, pour la plupart des ingénieurs, trop complexe (espaces de Sobolev, analyse hilbertienne, condition LBB, théorie de l'interpolation, formulation variationnelle, résidus pondérés), et des manquements vis-à-vis des interprétations physiques et intuitives sont souvent mentionnés pour préférer les

méthodes de volumes finis à la méthode des éléments finis. Ceci explique pourquoi la recherche en dynamique des fluides numérique (Computational Fluid Dynamics, CFD) contient une part de développements plus importante concernant la méthode des volumes finis, principalement pour des considérations pratiques. Les méthodes de volumes finis sont construites sur des bilans de conservation locale, mais appartiennent aussi, comme la méthode des éléments finis, à la classe des méthodes résiduelles.

Mentionnons les premiers articles concernant l'application de la méthode des éléments finis pour résoudre des problèmes d'écoulements incompressibles : Thompson et al (1969), Oden (1970), Cheng (1972) ou Taylor et Hood (1973). Au niveau discret, la conservation de la masse et les problèmes de stabilité associés sont la plupart du temps esquivés à l'aide de formulations stabilisées qui permettent d'obtenir une divergence du champ de vitesse proportionnelle à une puissance de la taille de maille h , habituellement au premier ordre. La plupart des travaux publiés sur le sujet sont des expériences numériques, des analyses (ou les deux) concernant l'impact des nombreuses variantes de discrétisations (basiquement sur les fonctions de bases en vitesse et en pression) sur la précision et la stabilité.

Il est reconnu (Gresho et Sani (1998)) que la méthode des éléments finis est la mieux adaptée pour des problèmes elliptiques. Cependant d'un point de vue pratique, la méthode des éléments finis s'inscrit dans une stratégie de résolution où les équations sont couplées et résolues par le biais de la méthode de Newton associée à des méthodes directes de résolution de systèmes linéaires, par opposition aux méthodes des volumes finis où les équations sont découplées et bien adaptées à l'application de méthodes itératives. En écartant la notion de précision, les méthodes itératives permettent des réductions tangibles de temps de calculs et offrent également des rayons de convergence plus importants pour la méthode de Newton. Cependant, la

convergence des algorithmes est souvent confrontée à une augmentation significative des itérations globales, et ne permettent pas toujours de satisfaire des tolérances restrictives sur la précision des calculs. C'est pourquoi les développements récents des méthodes de volumes finis sont axés sur des stratégies utilisant les méthodes itératives pour résoudre les équations de façon couplée, et les développements des méthodes d'éléments finis sont axés sur des stratégies itératives associées à un découplage partiel des équations.

La méthode des éléments finis peut être considérée comme une généralisation des méthodes de volumes finis, dans le sens où ces dernières présentent plus de similarités que de différences lorsqu'elles sont comparées à des formulations de type éléments-finis de bas ordre. La méthode des éléments finis munie d'éléments de bas ordre représente une version généralisée fiable des méthodes de volumes-finis (Gresho et Sani (1998)). Les problèmes de temps de calcul permettant d'aborder des problèmes à grandes échelles sont des domaines de recherche actifs. Les méthodes de volumes finis présentent le plus souvent des schémas qui sont loin d'être simples et qui ne sont pas toujours faciles à interpréter physiquement lorsque ceux-ci sont appliqués sur des géométries complexes, notamment à cause des transformations associées. De plus, la conservation locale n'implique pas nécessairement une précision locale et la majorité des méthodes de type volumes-finis utilisent des techniques de condensation de masse (technique de diagonalisation) qui pervertissent ou polluent les considérations de conservation, en particulier pour des problèmes transitoires. La méthode des éléments finis possède les avantages suivants :

- flexibilité au niveau de la géométrie ;
- précision et facilité pour appliquer des conditions naturelles aux bords, et notamment en sortie de l'écoulement ;
- conservation des quantités quadratiques ;
- conservation de certaines propriétés des opérateurs continus lors de leur discrétisation ;

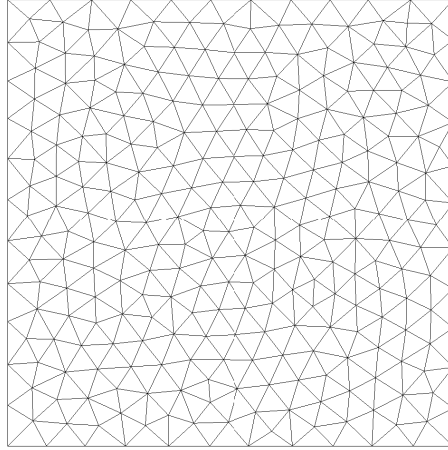


Figure 1.5: Exemple de triangulation du domaine Ω

tisation (symétrie, i.e. auto-adjoint) ;

- vitesse de phase toujours plus précise (par opposition aux techniques de condensation de masse utilisées en volumes-finis) ;
- surclasse les méthodes de volumes-finis pour des problèmes elliptiques.

Notre choix est donc orienté sur l'utilisation de la méthode des éléments finis pour résoudre les équations de conservation (1.1) et (1.3).

1.2.1 La discrétisation en espace

On désigne l'espace des fonctions continues à valeurs réelles et définies sur Ω par $C^0(\Omega)$. L'espace des fonctions scalaires de carré intégrable est défini par

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\},$$

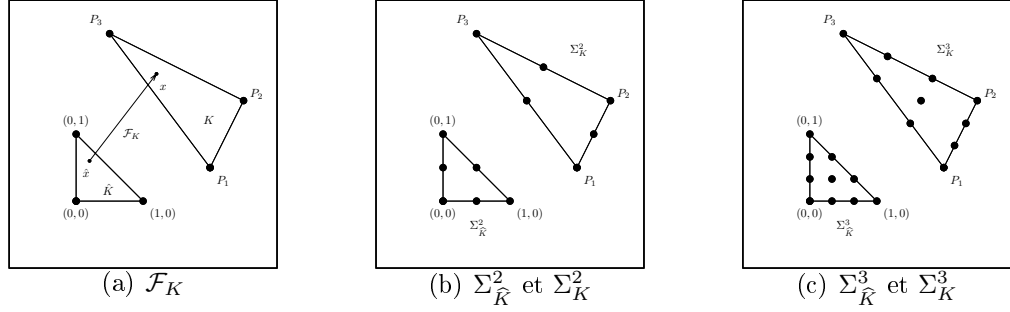


Figure 1.6: Illustration de la transformation \mathcal{F}_K et des treillis quadratique et cubique associés à un triangle

et nous notons $H^1(\Omega)$ l'espace défini par

$$H^1(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid v \in L^2(\Omega) \text{ et } \nabla v \in (L^2(\Omega))^2 \right\}.$$

On note \mathcal{T}_h une triangulation du domaine Ω (cf. figure 1.5), et K un triangle quelconque de \mathcal{T}_h . On note \mathcal{F}_K l'application qui définit une transformation d'un élément de référence \hat{K} vers l'élément K :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_K : \hat{K} &\longrightarrow K \\ \hat{\mathbf{x}} &\longmapsto \mathbf{x} = \mathcal{F}_K(\hat{\mathbf{x}}), \end{aligned} \tag{1.33}$$

telle qu'illustrée à la figure 1.6(a).

On définit \mathcal{P}^k l'espace des polynômes à coefficients réels de degré au plus k ,

$$\mathcal{P}^k = \left\{ q \mid q(x, y) = \sum_{0 \leq i+j \leq k} a_{ij} x^i y^j, a_{ij} \in \mathbb{R} \right\},$$

et dont la dimension est donnée par $\dim(\mathcal{P}^k) = \frac{(k+1)(k+2)}{2} = n_k$.

Définition 1.1 On note les noeuds d'interpolation de Lagrange de degré k comme

étant le treillis d'ordre k défini sur le triangle \widehat{K} ayant \mathbf{z}_1 , \mathbf{z}_2 et \mathbf{z}_3 pour sommets,

$$\Sigma_{\widehat{K}}^k = \left\{ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{z}_i, \sum_{i=1}^3 \lambda_i = 1, \lambda_i \in \left\{ 0, \frac{1}{k}, \dots, \frac{k-1}{k}, 1 \right\} \right\}, \quad (1.34)$$

et dont le nombre de points est donné par $|\Sigma_{\widehat{K}}^k| = \frac{(k+1)(k+2)}{2} = n_k$.

Sur l'élément global K , le treillis d'ordre k est donné par $\Sigma_K^k = \mathcal{F}_K \left(\Sigma_{\widehat{K}}^k \right)$.

On note $\widehat{\mathcal{N}}_i$ la base de $P^k(\widehat{K})$, dite de Lagrange, uniquement déterminée par

$$\widehat{\mathcal{N}}_i^k(\hat{\mathbf{x}}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j; \\ 1, & i = j \end{cases}, \quad \hat{\mathbf{x}}_j \in \Sigma_{\widehat{K}}^k. \quad (1.35)$$

Les figures 1.6(b) et 1.6(c) représentent les treillis Σ_K^2 et Σ_K^3 . De façon globale, l'ensemble Σ_h^k est défini par la réunion des treillis des n_e éléments de la triangulation \mathcal{T}_h :

$$\Sigma_h^k = \cup_{K \in \mathcal{T}_h} \Sigma_K^k = \{X_i; 1 \leq i \leq N_k, N_k < n_k n_e\}. \quad (1.36)$$

On note $W_h^k \subset H^1(\Omega)$ l'espace élément-finis des fonctions de $L^2(\Omega)$ dont la restriction à un élément $K \in \mathcal{T}_h$ est polynomiale de degré k :

$$W_h^k = \{f \in L^2(\Omega) \mid f|_K \in \mathcal{P}^k, K \in \mathcal{T}_h\}. \quad (1.37)$$

La dimension de W_h^k est donnée par $\dim(W_h^k) = n_e \frac{(k+1)(k+2)}{2}$ où n_e est le nombre de triangles.

On note également $V_h^k \subset W_h^k$, le sous-espace des fonctions continues

$$V_h^k = \{f \in \mathcal{C}^0(\Omega) \mid f|_K \in \mathcal{P}^k, K \in \mathcal{T}_h\}, \quad (1.38)$$

et dont la dimension est donnée par $\dim(V_h^k) = n_s + \frac{(k-1)(n_e(k+1)+n_{af})}{2}$, où n_s est le nombre de sommets et n_{af} est le nombre d'arêtes frontières de la triangulation \mathcal{T}_h . Ceci nous permet de définir globalement la base de Lagrange.

Définition 1.2 *La base de Lagrange de $V_h^k(\mathcal{T}_h)$ est constituée des uniques fonctions $\mathcal{N}_i^k \in V_h^k(\mathcal{T}_h)$ telles que*

$$\mathcal{N}_i^k(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}, \mathbf{x}_j \in \Sigma_h^k.$$

Nous pouvons maintenant définir l'opérateur d'interpolation nodale I_h^k de degré k , ou opérateur d'interpolation de Lagrange, par

$$\begin{aligned} I_h^k : C^0(\Omega) &\longrightarrow V_h^k \\ f &\longmapsto I_h^k(f) := \sum_{X_i \in \Sigma_h^k} f(X_i) \mathcal{N}_i^k. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Rappelons que le gradient de l'opérateur d'interpolation I_h^k est un élément de l'espace $W_h^{k-1} \times W_h^{k-1}$:

$$\begin{aligned} \nabla I_h^k : V_h^k &\longrightarrow W_h^{k-1} \times W_h^{k-1} \\ f &\longmapsto \nabla I_h^k f(\mathbf{x}) := \sum_{X_i \in \Sigma_h^k} f(X_i) \nabla \mathcal{N}_i^k. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Pour une triangulation \mathcal{T} du domaine Ω , nous définissons le sous-espace des fonctions qui s'annulent aux bords par

$$V_{h,0}^k = \{v \in V_h^k \mid v(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega_D\}. \quad (1.41)$$

La formulation faible standard du système d'équations de Navier-Stokes s'écrit :

Trouver $F \in V_h^f, p \in W_h^p, \mathbf{u} \in V_h^u$ tels que $\forall w \in V_{h,0}^f, \forall q \in W_h^p, \forall \mathbf{v} \in V_{h,0}^u$,

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\mathcal{L}_F, w)_{0,\Omega} & = 0; \\ (\rho(F) \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mathbf{g} \right), \mathbf{v})_{0,\Omega} & = (\mathbf{s}(\mathbf{u}, p) + \mathbf{f}_\Gamma(F), \mathbf{v})_{0,\Omega} + (\mathbf{t}_N, \mathbf{v})_{0,\partial\Omega_N}; \\ (\mathcal{L}_p, q)_{0,\Omega} & = 0; \\ (\mu(F), w)_{0,\Omega} & = (\mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)F, w)_{0,\Omega}; \\ (\rho(F), w)_{0,\Omega} & = (\rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)F, w)_{0,\Omega}, \end{array} \right.$$

avec $\mathbf{s}(\mathbf{u}, p) = p\nabla\mathbf{u} - \frac{\mu(F)}{2} (\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)$.

Méthode de Newton

La linéarisation du système global formé des équations de conservation et de l'équation de transport s'effectue par le biais des méthodes de point fixe et de Newton. Pour appliquer la méthode de Newton, nous écrivons la formulation faible sous forme résiduelle. Nous notons

$$\mathbf{R}(F, \mathbf{u}, p; w, \mathbf{v}, q) = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_F(F, \mathbf{u}, w) \\ \mathbf{R}_u(F, \mathbf{u}, p, \mathbf{v}) \\ \mathbf{R}_p(\mathbf{u}, q) \end{pmatrix}$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{R}_F(w) & = (\mathcal{L}_F, w)_{0,\Omega}; \\ \mathbf{R}_u(\mathbf{v}) & = (\rho(F) \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mathbf{g} \right) - \mathbf{s}(\mathbf{u}, p) + \mathbf{f}_\Gamma(F), \mathbf{v})_{0,\Omega} + (\mathbf{t}_N, \mathbf{v})_{0,\partial\Omega_N}; \\ \mathbf{R}_p(q) & = (\mathcal{L}_p, q)_{0,\Omega}. \end{array} \right.$$

Pour chacune des itérations de Newton, notée par l'indice ℓ , une correction \mathbf{E} est

déterminée par la résolution du système linéaire

$$\mathbf{J}_R(F_\ell, \mathbf{u}_\ell, p_\ell; w, \mathbf{v}, q) \begin{pmatrix} E_F \\ E_{\mathbf{u}} \\ E_p \end{pmatrix} = -\mathbf{R}(F_\ell, \mathbf{u}_\ell, p_\ell; w, \mathbf{v}, q), \quad (1.42)$$

où \mathbf{J}_R désigne la matrice jacobienne du système non linéaire qui est ici calculée numériquement par différences finies à l'aide d'un schéma centré d'ordre 2.

Il existe d'autres méthodes pour calculer efficacement la matrice jacobienne \mathbf{J}_R , comme l'utilisation d'une méthode de quasi-Newton, mais ceci n'est pas inclus dans notre cadre de travail. Mentionnons également l'existence de bibliothèques de dérivation automatique qui peuvent être utilisées efficacement pour ce genre de problème. Quelques techniques complémentaires peuvent être très utiles comme les techniques de « Backtracking Line Search » dont le but est d'ajuster le pas effectué dans la direction de descente pour s'assurer de la décroissance du résidu

$$\mathbf{X}_{\ell+1} = \mathbf{X}_\ell - \tau \mathbf{J}_R^{-1}(\mathbf{X}_\ell) \mathbf{R}(\mathbf{X}_\ell), \quad (1.43)$$

où τ est un paramètre choisi de façon à ce que $\|\mathbf{R}(\mathbf{X}_{\ell+1})\| < \|\mathbf{R}(\mathbf{X}_\ell)\|$.

Sous forme matricielle, le système (1.42) est équivalent à

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{C} & 0 \\ \mathbf{D} & \mathbf{A} & -\mathbf{B}^T \\ 0 & \mathbf{B} + \mathbf{S}_1 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_F \\ E_{\mathbf{u}} \\ E_p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{R}_F(w) \\ \mathbf{R}_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}) \\ \mathbf{R}_p(q) \end{pmatrix}, \quad (1.44)$$

où :

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{R}_F}{\partial F_j}(w_i); \\ \mathbf{C}_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{R}_F}{\partial \mathbf{u}_j}(w_i); \\ \mathbf{D}_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial F_j}(\mathbf{v}_i); \\ \mathbf{A}_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial \mathbf{u}_j}(\mathbf{v}_i); \\ \mathbf{B}_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{R}_p}{\partial \mathbf{u}_j}(q_i), \end{cases}$$

et où les matrices \mathbf{S} et \mathbf{S}_1 sont non nulles lorsqu'une méthode stabilisée est utilisée pour les équations de Navier-Stokes.

L'application des méthodes itératives pour déterminer la direction de descente de la méthode de Newton est basée sur une décomposition de Schur du système précédent. On pose $\bar{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{pmatrix}$, $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{C} \\ \mathbf{D} & \mathbf{A} \end{pmatrix}$, $\mathbf{K}_1 = \mathbf{S} + \bar{\mathbf{B}}\mathbf{K}^{-1}\bar{\mathbf{B}}^T$, $\mathbf{K}_2 = \bar{\mathbf{B}}\mathbf{K}^{-1}$, $\mathbf{R}_{FU} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_F \\ \mathbf{R}_U \end{pmatrix}$ et $\mathbf{E}_{FU} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_F \\ \mathbf{E}_U \end{pmatrix}$. Le système d'équations linéaires peut alors se réécrire comme

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \bar{\mathbf{B}}^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{FU} \\ \mathbf{E}_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{K}_2 & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathbf{R}_{FU} \\ -\mathbf{R}_p \end{pmatrix}. \quad (1.45)$$

Formulations stabilisées

L'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.3) est discrétisée par une formulation de type Galerkin. La discrétisation de la vitesse et de la pression s'effectue à l'aide de l'élément de *Crouzeix-Raviart*. Le champ de vitesse est discrétisé avec un interpolant continu quadratique enrichi d'une fonction bulle, dont le degré est désigné par $k = 2+$, et la pression est discrétisée à l'aide d'un interpolant

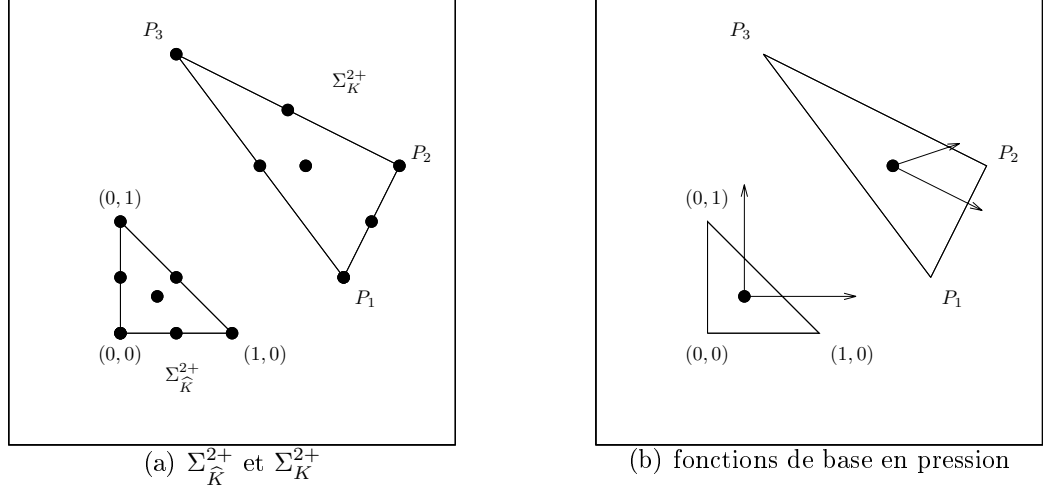


Figure 1.7: Interpolant de Crouzeix-Raviart

linéaire discontinu ($k=1$) (cf. figure 1.7) de la façon suivante :

$$p_h(\mathbf{x}) = p(\mathbf{c}) + (\mathbf{x} - \mathbf{c}) \cdot \nabla p(\mathbf{c}),$$

où \mathbf{c} désigne le barycentre de l'élément. Cet élément est connu pour être précis d'ordre $O(h^2)$ et vérifie la condition de Ladyzhenskaya-Babuška-Brezzi (Brezzi (1974)) qui assure l'existence et l'unicité de la solution (\mathbf{u}_h, p_h) du problème discret ainsi que la convergence de la solution discrète vers la solution exacte (\mathbf{u}, p) :

$$\inf_{q \in W_h^p} \sup_{\mathbf{v} \in W_h^p} \frac{\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_1 \|q\|_0} \geq C > 0, \quad (1.46)$$

où la constante C est indépendante de la taille de maille h . La contrainte d'incompressibilité (1.1) est satisfaite par une méthode de *lagrangien augmenté*, et plus précisément à l'aide d'une généralisation de l'*algorithme d'Uzawa* (Fortin et Fortin

(1985)) :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{C} & 0 \\ \mathbf{D} & \mathbf{A} + \tau_p \mathbf{B}^T \mathbf{B} & -\mathbf{B}^T \\ 0 & \mathbf{B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_F \\ E_{\mathbf{u}} \\ E_p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{R}_F \\ \mathbf{R}_{\mathbf{u}} \\ \mathbf{R}_p \end{pmatrix},$$

où τ_p est un paramètre de pénalisation.

Une première approche de discrétisation de l'équation de transport utilise une méthode stabilisée connue pour être bien adaptée aux équations hyperboliques linéaires, à savoir une formulation stabilisée de type « Streamline-Upwind Petrov-Galerkin » (SUPG) munie d'un interpolant quadratique. Cette méthode est choisie car il s'agit d'une méthode résiduelle dans le sens où la solution de l'équation modifiée satisfait l'équation initiale, contrairement à la méthode « Streamline-Upwind » (SU). Les fonctions tests $w \in V_h^2$ sont modifiées pour obtenir

$$\psi_F(w, \mathbf{u}) = w + \tau_{SUPG}^F \mathbf{u} \cdot \nabla w. \quad (1.47)$$

Cela revient à introduire un décentrage, dont l'intensité est τ_{SUPG}^F , uniquement dans la direction des lignes de courant. Le paramètre τ_{SUPG}^F optimal, à évaluer à chaque point d'intégration, est choisi comme

$$2\tau_{SUPG}^F = \max_{\mathbf{h} \in K} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{h}}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}} \leq \max_{\mathbf{e}_i \in K} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_i}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}},$$

où \mathbf{e}_i désigne une arête du triangle K . L'application de la méthode SUPG demande une modification mineure. Le résidu devient

$$\mathbf{R}(F, \mathbf{u}, p, \psi_F(w, \mathbf{u}), \mathbf{v}, q).$$

Mentionnons que pour des problèmes dont le terme d'accélération est dominant,

les équations de Navier-Stokes peuvent également être stabilisées par la méthode SUPG :

$$\mathbf{R}(F, \mathbf{u}, p, \psi_F(w, \mathbf{u}), \psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}, \mathbf{u}), q) = \mathbf{0},$$

où

$$\psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \mathbf{v} + \tau_{SUPG}^{\mathbf{u}} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (1.48)$$

Lorsque les espaces discrets en vitesse et en pression ne respectent pas la condition (1.46), la pression peut être stabilisée par la méthode « Pressure Stabilized Petrov-Galerkin » (PSPG), introduite pour les équations de Stokes par Hughes *et al.* (1986), et par Tezduyar *et al.* (1992) pour les équations de Navier-Stokes :

$$\mathbf{R}(F, \mathbf{u}, p, \psi_F(w, \mathbf{u}), \psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}, \mathbf{u}), q + \tau_{PSPG} \nabla q \mathcal{L}_u) = \mathbf{0},$$

ce qui complète le système (1.44) par le biais des matrices \mathbf{S}_1 et \mathbf{S} .

De nombreuses formules sont disponibles concernant le choix des paramètres de stabilisations $\tau > 0$. Par exemple, on peut utiliser :

- $\tau_{PSPG} = \mathcal{O}(\frac{h^2 \rho}{\mu})$ pour de faibles nombres de Reynolds ;
- $\tau_{PSPG} = \mathcal{O}(\frac{h}{\|\mathbf{u}\|})$ pour des nombres Reynolds importants.

Après avoir noté $Re_h = \frac{\|\mathbf{u}\| h \rho}{\mu}$, mentionnons quelques exemples de paramètres (Christie *et al.* (1976), Shakib *et al.* (1991)) basés sur la fonction coth :

$$\tau_{PSPG} = \frac{h}{2\|\mathbf{u}\|} \left(\coth(Re_h) - \frac{1}{Re_h} \right); \quad (1.49)$$

$$\tau_{PSPG} = \frac{h}{2\|\mathbf{u}\|} \left(1 + \frac{1}{Re_h^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left(\left(\frac{2\|\mathbf{u}\|}{h} \right)^2 + \left(\frac{4\mu}{\rho h^2} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.50)$$

Dans le cas transitoire, Marchandise propose dans sa thèse de doctorat (2006)

l'ajout d'un terme dépendant de la discrétisation en temps :

$$\tau = \left(\left(\frac{2\|\mathbf{u}\|}{h} \right)^2 + \left(\frac{4\mu}{\rho h^2} \right)^2 + \left(\frac{2}{\Delta t} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.51)$$

Une pratique commune est de choisir le paramètre $\tau_{SUPG}^{\mathbf{u}} = \tau_{PSPG}^{\mathbf{u}}$. Une excellente bibliographie sur les méthodes stabilisées est proposée par Fries et Matthies (2004).

Imposition des conditions de glissement

Pour imposer les contraintes de glissement (1.16) sur la frontière du domaine, nous utilisons la méthode proposée par Page *et al.* (1997). Cette méthode consiste à imposer les contraintes de façon faible par l'introduction de multiplicateurs de Lagrange λ_S . Le résidu des contraintes s'écrit

$$R_\lambda(\mathbf{u}) = - \int_{\partial\Omega_S, \mathbf{u}} \lambda_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_\Gamma ds, \quad (1.52)$$

et la linéarisation de Newton est complétée de la façon suivante :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{C} & 0 & 0 \\ \mathbf{D} & \mathbf{A} & -\mathbf{B}^T & -\mathbf{L}^T \\ 0 & \mathbf{B} + \mathbf{S}_1 & \mathbf{S} & 0 \\ 0 & \mathbf{L} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_F \\ E_{\mathbf{u}} \\ E_p \\ E_\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_F \\ R_{\mathbf{u}} \\ R_p \\ R_\lambda \end{pmatrix},$$

où $\mathbf{L}_{ij} = \frac{\partial R_\lambda(\mathbf{u}_j)}{\partial \lambda_i}$. Page *et al.* (1997) précisent que

$$-\lambda = -p + 2\mu \frac{\partial \mathbf{u}_n}{\partial \mathbf{n}},$$

et privilégient l'utilisation de l'espace de discrétisation de la pression pour discrétiser les multiplicateurs de Lagrange λ .

1.2.2 La discrétisation en temps

Deux approches sont possibles pour discrétiser un problème transitoire avec une approche eulérienne. Une première approche, dont le caractère est « systématique », est d'ajouter une dimension supplémentaire représentant le temps dans les espaces fonctionnels utilisés. Pour effectuer une simulation numérique transitoire sur un domaine spatial $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, un maillage du domaine $\Omega \times [t_0, t_f]$ est calculé (cf. figure 1.8). La complexité algorithmique de la simulation numérique est beaucoup plus importante et le calcul d'un maillage en dimension 4 (ainsi que la résolution numérique des équations sur de tels éléments) peut être considéré comme « ésotérique ». Il est par contre intéressant d'utiliser cette approche pour la visualisation d'une simulation numérique transitoire dont la dimension du domaine spatial est inférieure à 3. Nous utilisons une approche semi-discrète pour la discrétisation en temps. D'innombrables schémas numériques sont disponibles pour discrétiser les dérivées en temps. L'avantage des méthodes explicites réside dans leur apparente simplicité mais possèdent plusieurs désavantages. D'abord elles possèdent la propriété non réjouissante d'être conditionnellement stables, i.e. que l'utilisation de ces méthodes nous expose à une condition CFL trop restrictive sur la taille du pas de temps. Par ailleurs, pour que ces méthodes soient robustes, elles sont souvent associées à des schémas TVD (Cockburn *et al.* (2000), Xiangrong et Shephard (2004)). Notre cadre de recherche s'inscrit dans une utilisation des méthodes implicites connues pour être inconditionnellement stables mais qui présentent l'inconvénient de posséder une complexité algorithmique beaucoup plus importante. Mentionnons que des études ont été réalisées sur l'application de ces schémas pour des problèmes

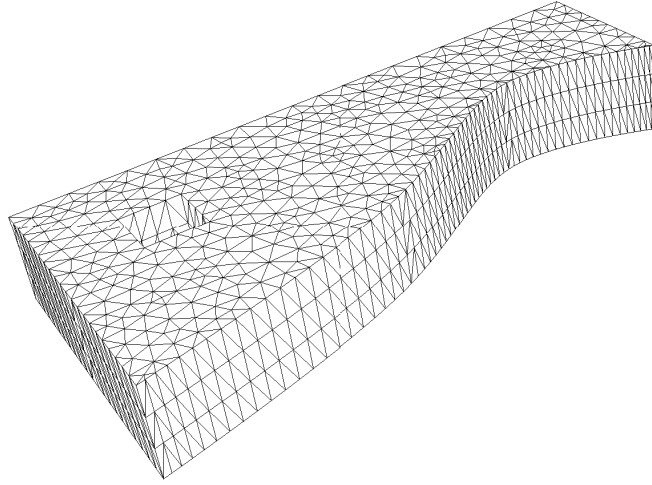


Figure 1.8: Exemple de maillage 2D espace-temps construit par extrusion de 2 pas de temps

multiphasés. Gao (1999) applique la méthode d'Euler sur des problèmes de remplissage. Tezduyar *et al.* (1998) utilisent la méthode des trapèzes sur des problèmes de ballotement et Béliveau *et al.* (1998) appliquent la méthode de Gear sur des problèmes à surface libre dans des écoulements cisailés. Malidi *et al.* (2000) effectuent une revue de ces schémas et proposent une classification vis-à-vis de la performance de la conservation de la quantité de volume, et nous pouvons retenir que la performance de la méthode des trapèzes n'est pas au rendez-vous, en contradiction avec son utilisation très répandue dans la communauté scientifique. Pour plus de simplicité nous introduisons les fonctionnelles $\mathbf{Y}_t(t, F, \mathbf{u}, p)$ et $\mathbf{Y}(F, \mathbf{u}, p)$ telles que

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{Y}_t(t, F, \mathbf{u}, p) + \mathbf{Y}(F, \mathbf{u}, p),$$

et nous notons $\mathbf{X}_n = \begin{pmatrix} F_n \\ \mathbf{u}_n \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\mathbf{Y}_n = \mathbf{Y}_t(t_n, F_n, \mathbf{u}_n, p_n)$.

Avec la méthode d'Euler, la méthode des trapèzes et la méthode de Gear appliquées pour discrétiser la version homogène de l'équation précédente nous avons respectivement :

$$\mathbf{X}_n - \Delta_{n-1} \mathbf{Y}_n = \mathbf{X}_{n-1}; \quad (1.53)$$

$$\mathbf{X}_n - \frac{\Delta_{n-1}}{2} \mathbf{Y}_n = \mathbf{X}_{n-1} - \frac{\Delta_{n-1}}{2} \mathbf{Y}_{n-1}, \quad (1.54)$$

et

$$\mathbf{X}_n - \frac{\Delta_n + \Delta_{n-1}}{2 + \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_n}} \mathbf{Y}_n = \mathbf{X}_{n-1} + \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1} \left(2 + \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_n}\right)} (\mathbf{X}_{n-1} - \mathbf{X}_{n-2}). \quad (1.55)$$

À chaque itération de Newton de chaque pas de temps, on résout le système linéaire

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{C} & 0 \\ \mathbf{D} & \mathbf{A} & -\mathbf{B}^T \\ 0 & \mathbf{B} + \mathbf{S}_1 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{F_n} \\ E_{\mathbf{u}_n} \\ E_{p_n} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_{F_n} \\ R_{\mathbf{u}_n} \\ R_{p_n} \end{pmatrix}.$$

Si on applique un traitement explicite de F dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement alors on remplace F_n par F_{n-1} :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{C} & 0 \\ 0 & \mathbf{A}(F_{n-1}) & -\mathbf{B}^T \\ 0 & \mathbf{B} + \mathbf{S}_1 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{F_n} \\ E_{\mathbf{u}_n} \\ E_{p_n} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_{F_n} \\ R_{\mathbf{u}_n}(F_{n-1}) \\ R_{p_n} \end{pmatrix}.$$

Ce traitement explicite, également appliqué sur la force capillaire, présente le désavantage d'exiger un contrôle de la taille du pas de temps. Brackbill *et al.* (1992) proposent la restriction suivante :

$$\Delta t \leq \sqrt{\frac{h^3}{\|\mathbf{u}\|_\infty}}.$$

Les approches découplées utilisent des traitements explicites pour annuler certains blocs matriciels du système précédent. Le découplage de l'équation de transport peut s'effectuer en choisissant le champ de vitesse \mathbf{u}_{n-1} de telle sorte que $\mathbf{C} = \frac{\partial R_{F_n}}{\partial \mathbf{u}_n} = \mathbf{0}$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A} & -\mathbf{B}^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} + \mathbf{S}_1 & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_F \\ E_{\mathbf{u}} \\ E_p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_F \\ R_{\mathbf{u}}(F_{n-1}) \\ R_p \end{pmatrix}.$$

La matrice jacobienne calculée est alors altérée, la convergence quadratique de la méthode de Newton est perdue et le nombre d'itérations peut sensiblement augmenter. Il faut cependant appliquer une méthode de point-fixe pour corriger le retard introduit, ce qui diminue l'enthousiasme causé par la réduction de la taille des systèmes linéaires à résoudre. Nous utilisons une approche couplée où les paramètres physiques et la force volumique capillaire sont recalculés à chaque itération de la méthode de Newton pour proposer un schéma « le plus implicite possible ». Le coût algorithmique devient un aspect important. La figure 1.9 propose un résumé de l'algorithme de résolution transitoire.

Mentionnons que nous utilisons la version proposée par la compagnie Intel (Intel Math Kernel Library) des bibliothèques d'algèbre linéaire BLAS (Basic Linear Algebra Subroutines) et LAPACK (Linear Algebra PACKage). Cette bibliothèque inclut égale-

ment un résolveur de systèmes linéaires creux itératif/direct de type Lanczos très performant : PARDISO (Schenk et Gärtner (2004)).

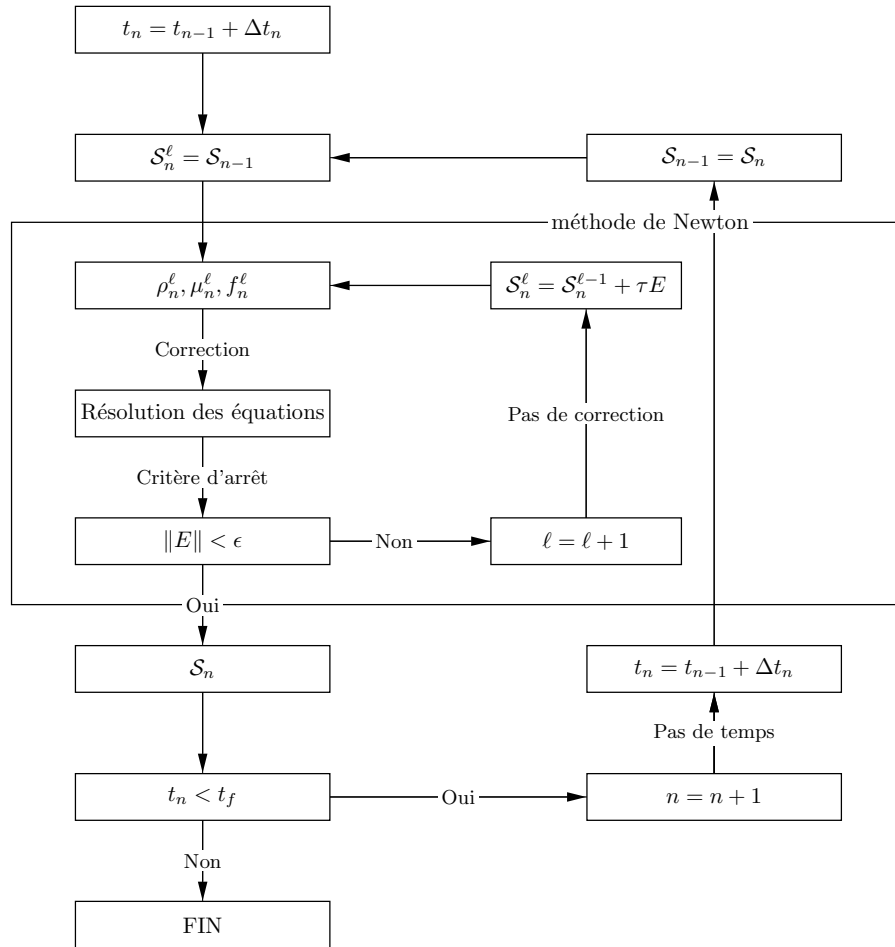


Figure 1.9: Schéma de résolution transitoire

1.2.3 La méthode de Galerkin discontinue appliquée à l'équation de transport

Nous nous intéressons aussi aux méthodes de Galerkin discontinues pour discrétiser l'équation de transport

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0, \quad (1.56)$$

où on aura pris soin de définir $F|_{\partial\Omega^-} = g$, où nous introduisons une décomposition de la frontière $\partial\Omega$ sous la forme $\partial\Omega = \partial\Omega^+ \cup \partial\Omega^-$, avec $\partial\Omega^+ = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega \mid \mathbf{n}_{\partial\Omega} \cdot \mathbf{u} \geq 0\}$ et $\partial\Omega^- = \{\mathbf{x} \in \partial\Omega \mid \mathbf{n}_{\partial\Omega} \cdot \mathbf{u} < 0\}$. Ces méthodes présentent un grand intérêt car la formulation variationnelle obtenue peut se résoudre élément par élément, permettant une réduction importante de la complexité des calculs, une parallélisation aisée des algorithmes et l'utilisation d'interpolants de haut ordre. Par ailleurs, des estimateurs d'erreurs efficaces basés sur ces méthodes ont été largement développés. L'équation (1.56) est donnée sous forme non conservative, ce qui n'a aucune incidence au niveau continu puisque le champ de vitesse est supposé incompressible. Dans le cas discret, certains auteurs comme Yang (2006) préfèrent discrétiser l'équation sous forme conservative,

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (F\mathbf{u}) = 0,$$

puisque numériquement, la condition d'incompressibilité n'est jamais parfaitement satisfaite.

Pour les conditions et les preuves concernant l'existence et l'unicité de la solution de l'équation (1.56), le lecteur pourra se référer à Leborgne (1992), Bardos (1970), Dautray et Lions (1993), et Houston *et al.* (2000). Avec une intégration par parties,

sans la dérivée partielle en temps, la relation (1.56) devient :

$$-\int_K F_h \nabla \cdot (v_h \mathbf{u}) dx + \int_{\partial K} F_h v_h \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds = \int_K f v_h dx, \quad \forall v_h \in \mathcal{P}^k(K). \quad (1.57)$$

On introduit les notations suivantes :

$$F_h^+(\mathbf{x}) = \lim_{\mathbf{x}^i \rightarrow \mathbf{x}} F_h(\mathbf{x}^i), \quad \mathbf{x}^i \in K;$$

$$F_h^-(\mathbf{x}) = \lim_{\mathbf{x}^i \rightarrow \mathbf{x}} F_h(\mathbf{x}^i), \quad \mathbf{x}^i \in \mathcal{T}_h \setminus K.$$

Les fonctions de $\mathcal{P}^k(K)$ n'étant pas nécessairement continues à l'interface des éléments de \mathcal{T}_h , un traitement particulier est nécessaire pour le calcul de $(F_h \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}$. En suivant un développement proposé par Lang et Walter (1995), ce calcul est approximé par un flux numérique $h(F_h^+, F_h^-)$ qui vérifie $h(F, F) = (F \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}$ et tel que $h(a, b)$ satisfait $\frac{\partial h}{\partial a}(a, b) > 0$ et $\frac{\partial h}{\partial b}(a, b) < 0$.

La relation (1.57) s'écrit alors : trouver $F_h \in \mathcal{P}^k(K)$ tel que $\forall K \in \mathcal{T}_h$,

$$-\int_K F_h \nabla \cdot (v_h \mathbf{u}) dx + \int_{\partial K} v_h h(F_h^+, F_h^-) ds = 0, \quad \forall v_h \in \mathcal{P}^k(K). \quad (1.58)$$

Lang et Walter (1995) utilisent le schéma monotone de type Engquist-Osher à deux points (Engquist et Osher (1980)) qui, pour une fonction arbitraire $fl(F)$, est défini par

$$h^{EO}(a, b) = \int_0^b \min(fl'(s), 0) ds + \int_0^a \max(fl'(s), 0) ds + fl(0),$$

i.e.

$$h^{EO}(F^+, F^-) = F^- \min(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 0) + F^+ \max(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 0) = \begin{cases} F^- \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, & \text{si } \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0; \\ F^+ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, & \text{si } \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \geq 0. \end{cases}$$

Il suffit d'introduire cette relation dans l'équation (1.58) et d'intégrer à nouveau

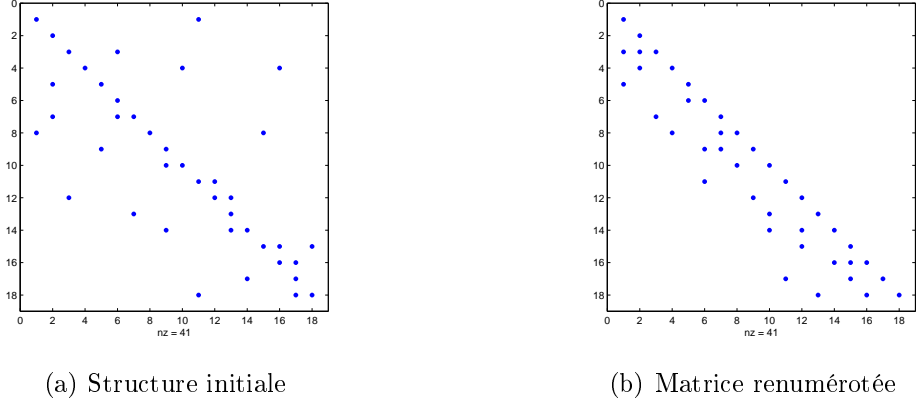


Figure 1.10: Illustration de la renumérotation symbolique de la structure de la matrice globale issue de la méthode Galerkin discontinue : (a) structure de la matrice initiale (associée à la relation d'adjacence illustrée à la figure 1.11), (b) structure de la matrice renumérotée dans le sens de l'écoulement.

par parties pour obtenir la formulation introduite par Reed et Hill (1973) : trouver $F_h \in \mathcal{P}^k(K)$ tel que $\forall K \in \mathcal{T}_h$ et $\forall v_h \in \mathcal{P}^k(K)$,

$$\int_K \mathbf{u} \cdot \nabla F_h v_h dK + \int_{\partial K^-} |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| (F_h^+ - F_h^-) v_h ds = 0, \quad (1.59)$$

avec $\partial K^- = \{\mathbf{x} \in \partial K : \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_K < 0\}$. En notant \mathbf{e} une arête du maillage et en sommant sur tous les éléments de \mathcal{T}_h , nous obtenons la formulation variationnelle sur Ω ,

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K (\mathbf{u} \cdot \nabla F_h) v_h dx + \sum_{e \in \partial \Omega_h} \int_e |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| [F_h] v_h ds = \sum_{e \in \partial \Omega^-} \int_e |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| g v_h ds,$$

où $[F_h] = F_h^+ - F_h^-$ est le saut de la variable sur une arête. La matrice globale issue de la méthode de Galerkin discontinue est une matrice par blocs (cf. figure 1.10(a)) dont la dimension est égale au nombre d'éléments du maillage. Les blocs diagonaux correspondent aux matrices élémentaires obtenues sur les éléments, et les blocs extra-diagonaux correspondent aux matrices élémentaires obtenues sur les arêtes

des éléments adjacents K_i et K_j où le flux est discrétisé. Dans notre approche, cette matrice n'est pas construite explicitement car le coût mémoire est très important. Cependant, ces matrices sont plus creuses que les matrices construites avec les méthodes de Galerkin continues. La convergence des méthodes itératives appliquées à la résolution des systèmes linéaires construits avec celles-ci est généralement bien meilleure. La renumérotation est donc basée sur la relation d'adjacence des

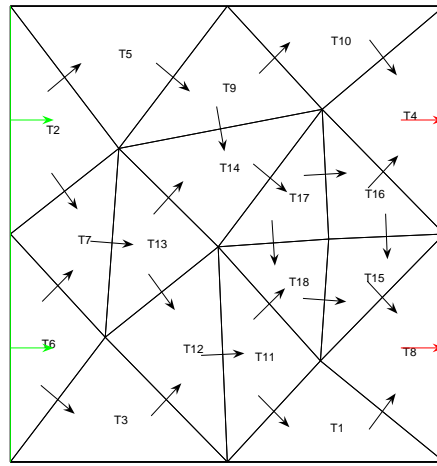


Figure 1.11: Relations d'adjacence des éléments dans le sens de l'écoulement pour un champ de vitesse uniforme $\mathbf{u} = (1, 0)$

éléments illustrée à la figure 1.11. Pour un champ de vitesse uniforme \mathbf{u} , il existe une renumérotation des éléments telle que l'approximation numérique de la solution de l'équation (1.59) puisse se calculer élément par élément (Lesaint et Raviart (1974)). Cette renumérotation existe également si $|\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| > 0, \forall K \in \mathcal{T}_h$ (Falk et Richter (1987)); ou encore si $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ (Touzani (1988)). En effet, dans le cas idéal et après renumérotation, la matrice globale est triangulaire inférieure par blocs, ce qui permet une résolution du système linéaire global par l'application d'un algorithme de descente triangulaire, ce qui correspond à une convergence de l'algorithme itératif de Gauss-Seidel en une seule itération. La figure 1.10(a) illustre

la structure par blocs de la matrice globale et la figure 1.10(b) illustre la structure triangulaire inférieure de la matrice renumérotée.

Dans la plupart des applications, les zones de recirculation du champ de vitesse entre deux éléments sont fréquentes et la résolution du système global nécessite une approche différente puisque la renumérotation optimale n'est pas toujours possible à déterminer, c'est-à-dire une renumérotation qui mène à une matrice triangulaire. L'application d'un algorithme par blocs de type Gauss-Seidel est un choix judicieux et permet d'obtenir une convergence en quelques itérations. Cette méthode est bien adaptée à une résolution élément par élément et elle s'avère être une approche beaucoup plus performante que l'approche globale pour des problèmes de grande taille. Mentionnons enfin que la méthode de Galerkin discontinue est simple à paralléliser et qu'une programmation soignée associée à une utilisation intensive et judicieuse des routines proposées par les bibliothèques BLAS et LAPACK permet d'obtenir des programmes très performants et peu coûteux (Marchandise et Remacle (2006)).

Une autre base polynomiale intéressante, dans le sens où elle permet une simplification des formes bilinéaires élémentaires, est la base orthonormale au sens L^2 de $\mathcal{P}^k(\hat{K})$ que nous notons $(\hat{\mathcal{O}}_i)_{1 \leq i \leq n_k}$. Comme son nom l'indique, cette base vérifie

$$\int_{\hat{K}} \hat{\mathcal{O}}_j \hat{\mathcal{O}}_i d\hat{K} = \delta_{ij}.$$

Un algorithme d'orthogonalisation de Gram-Schmidt permet d'obtenir facilement une telle base orthonormée à l'aide d'un logiciel de calcul symbolique (Maxima ou Maple) afin de s'éviter un calcul fastidieux.

Remarque 1.1 *Une base orthonormale sur l'élément de référence conserve son*

orthogonalité sur l'élément global K , mais n'est plus orthonormale puisque

$$\int_K \widehat{\mathcal{O}}_j(\mathcal{F}_K^{-1}) \widehat{\mathcal{O}}_i(\mathcal{F}_K^{-1}) dK = 2|K| \int_{\widehat{K}} \widehat{\mathcal{O}}_j \widehat{\mathcal{O}}_i d\widehat{K} = 2|K| \delta_{ij}.$$

Cette base nous permet de définir un autre opérateur que nous utiliserons dans cette thèse, qui est l'opérateur de projection locale au sens L^2 . Pour une fonction f donnée, cet opérateur est défini par

$$P_K^k(f) = \sum_{i=1}^{n_k} \widetilde{f}_{K,i} \widehat{\mathcal{O}}_i \quad (1.60)$$

où $\widetilde{f}_{K,i} = \int_{\widehat{K}} f(\mathcal{F}_K) \widehat{\mathcal{O}}_i d\widehat{K}$.

L'intérêt de la projection locale réside dans la propriété importante d'orthogonalité

$$\int_K (P_h^k(f) - f) \xi dK = 0, \quad \forall \xi \in W_h^k(K).$$

En pratique, les coefficients $\widetilde{f}_{K,i}$ sont approximés à l'aide d'une règle de quadrature définie sur l'élément de référence \widehat{K} avec un nombre n_g de points $\widehat{\mathbf{x}}_j$ associés aux poids w_j ,

$$\widetilde{f}_{K,i} = \sum_{j=1}^{n_g} w_j f(\mathcal{F}_K(\widehat{\mathbf{x}}_j)) \widehat{\mathcal{O}}_i(\widehat{\mathbf{x}}_j).$$

Nous pouvons étendre ce dernier opérateur de façon globale par

$$\begin{aligned} P_K^k : L^2(\Omega) &\longrightarrow W_h^k \\ f &\longmapsto (P_h^k f)_K := \sum_{i=1}^{n_k} \widetilde{f}_{K,i} \widehat{\mathcal{O}}_i. \end{aligned} \quad (1.61)$$

Remarque 1.2 Si on note l'erreur locale de l'interpolation nodale par $E_I(K) =$

$(f - I_h^k f)_K$, alors nous pouvons écrire

$$P_h^k(E_I) = P_h^k((f - P_h^k f) + (P_h^k f - I_h^k f)) = P_h^k f - I_h^k f.$$

Cette égalité signifie que la différence entre l'interpolation nodale de f et la projection locale de f est la projection locale de l'erreur d'interpolation nodale.

1.3 Le calcul numérique de la force capillaire

La force responsable de la tension superficielle, connue sous le nom de force capillaire, agit dans la direction normale à la surface libre. Nous avons vu qu'imposer une telle force nécessite l'évaluation d'une intégrale de surface incluant la normale \mathbf{n}_Γ et la courbure κ_Γ de la surface libre,

$$\mathbf{f}_\Gamma = \int_\Gamma \alpha \mathbf{n}_\Gamma \kappa_\Gamma d\Gamma,$$

où α est le coefficient de tension superficielle.

L'approche eulérienne pose une difficulté pour évaluer cette quantité puisque l'interface est définie implicitement. Le modèle proposé par Brackbill *et al.* (1992), connu sous le nom de Continuum Surface Force (CSF), permet de contourner cette difficulté en reformulant l'intégrale de surface par une intégrale de volume équivalente, tel que fait dans la première section de ce chapitre :

$$\int_\Omega \alpha \mathbf{n}_\Gamma \kappa_\Gamma \delta_\Gamma d\Omega,$$

où δ_Γ est la fonction de Dirac à l'interface vérifiant $\int_\Omega \delta_\Gamma d\Omega = |\Gamma|$, $|\Gamma|$ étant la longueur de la surface libre (l'aire en 3 dimensions).

La force capillaire volumique est exprimée sur le domaine Ω sous la forme faible :

$$\int_{\Omega} \mathbf{f}_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} \alpha \kappa_{\Gamma} \delta_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in V_h^{\mathbf{u}}, \quad (1.62)$$

et requiert le calcul de trois quantités :

1. la normale \mathbf{n}_{Γ} ;
2. la courbure κ_{Γ} ;
3. la fonction de Dirac δ_{Γ} .

À l'aide des relations (1.25) et (1.26), l'utilisation d'une méthode « level-set » inclut une force volumique capillaire $\mathbf{f}(\phi)$ exprimée sous la forme

$$\mathbf{f}_{\Gamma}^{\phi} = -\alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right) \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \delta_{\Gamma}. \quad (1.63)$$

Le terme (1.62) devient

$$\int_{\Omega} \mathbf{f}_{\Gamma}^{\phi} \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right) \delta_{\Gamma} \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \cdot \mathbf{v} d\Omega. \quad (1.64)$$

Avec la méthode de la pseudo-concentration, cette force s'exprime par

$$\mathbf{f}_{\Gamma}^H = -\alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla H_{\epsilon}}{\|\nabla H_{\epsilon}\|} \right) \nabla H_{\epsilon}, \quad (1.65)$$

où la fonction de Dirac est approximée par

$$\delta_{\Gamma} \approx |\nabla H_{\epsilon}|^2. \quad (1.66)$$

Dans le résidu faible des équations de Navier-Stokes, le terme (1.62) s'écrit

$$\int_{\Omega} \mathbf{f}_{\Gamma}^H \cdot \mathbf{v} d\Omega = - \int_{\Omega} \alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla H_{\epsilon}}{\|\nabla H_{\epsilon}\|} \right) \nabla H_{\epsilon} \cdot \mathbf{v} d\Omega. \quad (1.67)$$

Notons que Béliveau *et al.* (1998) proposent une autre formulation, équivalente au sens faible, du terme (1.67). Cette formulation possède l'avantage de n'impliquer que des dérivées du premier ordre et d'éviter le calcul explicite de la courbure :

$$\int_{\Omega} \alpha \kappa_{\Gamma} \nabla H_{\epsilon} \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} \alpha \left(\frac{\nabla H_{\epsilon} \otimes \nabla H_{\epsilon} - |\nabla H_{\epsilon}|^2 \mathbf{I}}{|\nabla H_{\epsilon}|} : \nabla \mathbf{v} \right) d\Omega. \quad (1.68)$$

La difficulté présente dans le calcul numérique du modèle Continuum Surface Force est le calcul de la relation (1.67).

Trois points importants sont à considérer :

- le choix de l'espace d'approximation pour le calcul de la force (1.65) ;
- le calcul de la normale à l'interface \mathbf{n}_{Γ} ;
- le calcul de la courbure à l'interface κ_{Γ} .

1.3.1 Les courants parasites

Prenons le problème \mathcal{P}_1 (cf. figure 1.3) où la gravité est négligée et où les conditions initiales et les conditions aux bords sont nulles. La solution exacte du système d'équations est donnée par une solution stationnaire comprenant un champ de vitesse

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}, \quad \forall t > 0,$$

et une pression p vérifiant

$$-\nabla p(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \quad \forall t > 0.$$

Le problème se situe, dans le cas discret, dans la formulation variationnelle qui doit préserver le caractère stationnaire de cette solution. La condition de consistance sur la pression est à prendre au sens des distributions dans la discrétisation du

système d'équations :

$$\int_{\Omega} -\nabla p_h \cdot \psi \mathbf{u} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \psi \mathbf{u} d\Omega, \quad \forall \psi \mathbf{u} \in V_h^{\mathbf{u}}, \quad P_h \in W_h^p.$$

Si la discrétisation de P_h ne permet pas de résoudre exactement cette équation, alors utiliser une telle discrétisation revient à introduire un terme source non nul dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, qui est compensé numériquement par une approximation non nulle \mathbf{u}_h . Cette imprécision numérique, le plus souvent masquée et négligée, donne naissance à des écoulements numériques non physiques générés dans un voisinage de l'interface. Selon l'intensité de ces courants, des oscillations assez fortes peuvent apparaître et détruire les interfaces (Renardy et Renardy (2002)). Ces courants parasites ne sont pas uniquement des imprécisions numériques mais une réelle limitation des méthodes interfaciales (Scardovelli et Zaleski (1999)). Ils apparaissent lorsque :

- la discrétisation de la pression est inconsistante vis-à-vis de la force capillaire ;
- le calcul de la force volumique discrète \mathbf{f}_h est imprécis, le plus souvent par le biais d'un calcul imprécis de la courbure κ_{Γ} .

Rappelons que le nombre de Laplace s'exprime sous la forme (cf. équation (1.31))

$$La = \frac{\alpha \rho \kappa_{\Gamma}}{\mu^2}, \quad (1.69)$$

avec le coefficient de tension superficielle α , la viscosité μ , la densité ρ et la courbure κ_{Γ} à l'interface. Notons que le seul paramètre qui peut varier au cours du temps dans le nombre de Laplace (1.69) est la courbure de l'interface. Les autres paramètres (physiques) sont invariants dans la catégorie des écoulements que nous abordons, les écoulements thermo-dépendants n'étant pas étudiés.

Les courants parasites deviennent un problème sérieux lorsque ce nombre est très grand, i.e. pour une faible viscosité ou une forte courbure :

$$La > 10^6.$$

Ce seuil correspond, dans le cas de l'eau et l'air, à une bulle dont le rayon est inférieur à 5mm (Scardovelli et Zaleski (1999)). Les courants parasites sont connus pour détériorer la précision des méthodes VOF, et dans une moindre mesure les méthodes « front tracking ». Ils restent un obstacle difficile à surmonter, particulièrement dans le cas des méthodes eulériennes (Scardovelli et Zaleski (1999)). Pour tenter de réduire leur intensité ou, dans le meilleur des cas, de les supprimer, plusieurs approches ont été proposées (Rudman (1997), Popinet et Zaleski (1999), Torres et Brackbill (2000), Renardy et Renardy (2002), Jamet *et al.* (2002), Enright *et al.* (2002)). Ces travaux se sont concentrés sur une approximation précise de la courbure et sur une formulation consistante des équations, avec l'utilisation des méthodes « front tracking », des méthodes VOF et des méthodes hybrides.

Si on considère que le calcul de \mathbf{f} est exact, alors la condition de consistance de la pression donne lieu à un choix particulier d'espace discret pour calculer le terme responsable de la tension superficielle. Avec une discrétisation linéaire de la pression, le gradient est une fonction constante élément par élément, i.e. $\nabla P_h \in W_h^0$. Le calcul de \mathbf{f}_h doit vérifier

$$\int_K (\nabla P_h - \mathbf{f}_h) \cdot \mathbf{v} dK = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in V_h^{\mathbf{u}}.$$

Remarque 1.3 *En réécrivant la précédente relation dans une base orthonormale, nous avons*

$$\int_K (a\psi_0 - \sum_j f_j \psi_j) \psi_i dK = (a - f_0) + f_i,$$

avec $a = \int_K \psi_0 \frac{\partial P_h}{\partial x} dK$ et $f_j = \int_K \psi_j f_x dK$. Lorsque l'espace choisi pour le calcul de la force capillaire est quelconque, l'erreur de la projection constante au sens $L_2(K)$ de la force volumique devient un terme source en $O(La h)$, où La est le nombre de Laplace et h est la taille de maille.

La méthodologie de calcul du modèle de la tension superficielle que nous proposons comprend la règle suivante. L'insertion d'une force \mathbf{f} dans la formulation faible des équations de Navier-Stokes s'effectue par l'intermédiaire de sa projection locale au sens $L_2(K)$ dans l'espace auquel appartient le gradient de pression. Dans le cas où la pression est discrétisée linéairement, alors le calcul de la forme faible des équations utilise la projection constante

$$\mathbf{f}_{h,K} = \frac{\int_K \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dK}{\int_K dK}. \quad (1.70)$$

1.3.2 Le calcul de la normale à l'interface

Si les informations de la normale et de la courbure à l'interface ne sont pas explicitement disponibles, contrairement au cas où l'interface est définie de façon paramétrée, plusieurs approches peuvent être proposées pour calculer ces quantités selon la nature de la méthode eulérienne utilisée. Pour une variable eulérienne continue, la normale peut être calculée à partir de la distance signée à l'interface (cf. figure 1.4(a)) à l'aide de la formule (1.25)

$$\mathbf{n}_\Gamma(\phi) = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}.$$

Avec la méthode de la pseudo-concentration, la variable eulérienne est une régularisation $H_\epsilon = v(\phi)$ de la fonction de Heaviside H (cf. figure 1.4(b)). La figure 1.12 illustre le voisinage Ω_ϵ de l'interface (dont une définition plus précise est donnée au

chapitre suivant), où le paramètre ϵ permet de contrôler le voisinage dans lequel la force capillaire volumique est évaluée. La dérivée de H_ϵ est une régularisation de la fonction de Dirac (cf. figure 1.4(c)) et nous avons

$$\frac{\partial H_\epsilon(\phi)}{\partial \phi} = \delta_\epsilon(\phi) \nabla \phi.$$

L'utilisation du calcul de la normale (1.25) par la méthode de la pseudo-concentration n'est valable que si $\delta_\epsilon(\phi)$ est strictement positive. En effet, avec la relation

$$\frac{\nabla H_\epsilon(\phi)}{|\nabla H_\epsilon(\phi)|} = \frac{v'(\phi) \nabla \phi}{|v'(\phi)| |\nabla \phi|} = \pm \mathbf{n},$$

il est facile de voir qu'un changement de signe de $v'(\phi)$ entraîne une inversion de la direction de la normale. Ceci est un point important que nous traitons au chapitre suivant où les techniques de régularisation sont abordées.

Dans le cas des méthodes VOF où la variable eulérienne est discontinue, une reconstruction de l'interface est nécessaire. Cette reconstruction s'effectue généralement à l'aide d'une reconstruction temporaire de la fonction distance en fonction des fractions de volume. Mentionnons quelques exemples d'algorithmes comme l'algorithme « Simple Linear Interface Calculation » (SLIC, Noh et Woodward (1976)), l'algorithme « Piecewise Linear Interface Calculation » (PLIC, Li et al. (1995)) ou encore l'algorithme de reconstruction « Parabolic Reconstruction Of Surface Tension » (PROST, Renardy et Renardy (2002)) qui consiste à approximer localement l'interface par une approximation quadratique qui est solution d'un problème aux moindres carrés non linéaire. Des fonctions splines de différents degrés sont aussi utilisées dans une approche proposée par Torres et Brackbill (2000) combinée avec une méthode « front tracking ». On peut mentionner un autre algorithme de reconstruction nommé « Level Contour Reconstruction Method » (LCRM), proposé par Shin et al. (2002) dans une approche eulérienne/lagrangienne. Une méthode

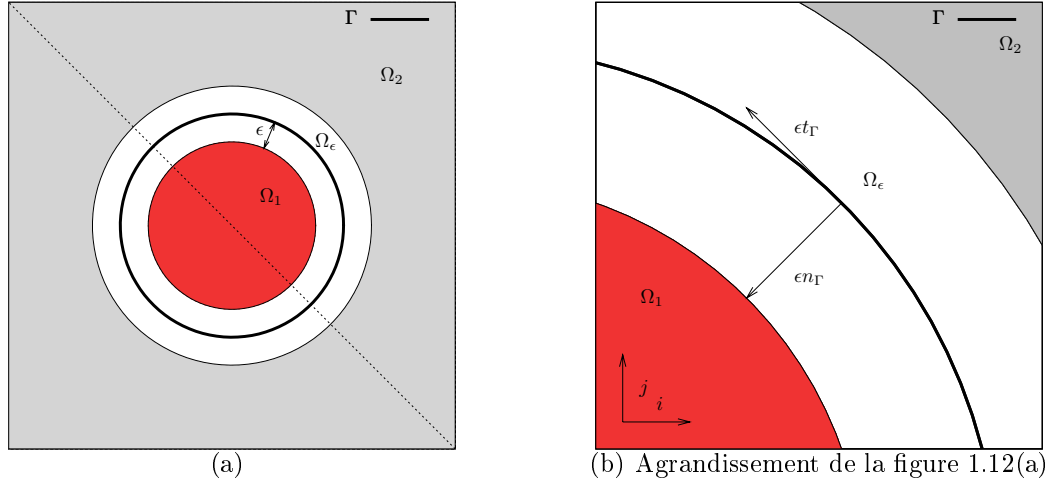


Figure 1.12: Domaine Ω_ϵ pour la configuration illustrée à la figure 1.3

similaire est proposée par Marchandise et Remacle (2006) avec l'utilisation des méthodes « level-set ».

Si on fait ici abstraction de la nécessité de détenir une résolution de maillage assez fine, alors le calcul de la normale à l'aide de la relation (1.25) requiert le calcul du gradient de la variable eulérienne suivi d'une normalisation :

1. calculer le gradient ∇F de la variable eulérienne F ;
2. calculer la normale \mathbf{n}_Γ par la normalisation du gradient ∇F .

Dans le cas de la méthode de la pseudo-concentration, le calcul de la normale présente quelques limitations que nous mentionnons ici. La normalisation du gradient de H_ϵ est confrontée à une difficulté souvent négligée dans la littérature. Si on prend le cas où les interfaces sont suffisamment éloignées les unes des autres, le gradient de H_ϵ est un champ vectoriel à support compact et la normalisation de ce champ vectoriel est assujettie à une tolérance η pour éviter une division par zéro :

$$\mathbf{n}_\Gamma(H_\epsilon) = \begin{cases} \frac{\nabla H_\epsilon}{\|\nabla H_\epsilon\|}, & \|\nabla H_\epsilon\|_2^2 > \eta; \\ 0, & \|\nabla H_\epsilon\|_2^2 \leq \eta. \end{cases}$$

Cependant cette façon de calculer introduit un paramètre utilisateur supplémentaire dont nous voulons minimiser le nombre afin d'assurer la robustesse et la généralité de la méthode. Elle présente surtout l'inconvénient d'introduire dans la normale calculée une discontinuité sur laquelle nous pourrions appliquer aveuglément un opérateur de divergence pour calculer la courbure. Cet inconvénient constitue cependant une information importante que nous exploitons pour le calcul de la courbure.

Dans le cas où les interfaces sont suffisamment proches les unes des autres, c'est-à-dire lorsqu'un changement topologique de l'interface intervient (coalescence, rupture), ou lorsque « l'épaisseur du fluide » devient très mince (formation de filament), un autre type de discontinuité est introduit par la présence des axes médians, que ce soit avec l'utilisation de la fonction distance signée ou avec l'utilisation de la régularisation de la fonction de Heaviside. Deux cas particuliers illustrent clairement cette problématique où la normale à l'interface est mal définie. Il suffit de considérer le problème \mathcal{P}_1 en choisissant le rayon r et le paramètre ϵ tel que $r < \epsilon$, ou de considérer le cas où la distance entre deux interfaces est suffisamment petite.

1.3.3 Le calcul de la courbure à l'interface

Le calcul de la courbure κ_Γ se base sur la normale \mathbf{n}_Γ et s'effectue à l'aide de la formule (1.26)

$$\kappa_\Gamma = -\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma(\phi).$$

Dans le cas de la méthode de la pseudo-concentration, cette dernière relation s'écrit

$$\mathbf{f}_H = -\alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla H_\epsilon}{\|\nabla H_\epsilon\|} \right) \nabla H_\epsilon. \quad (1.71)$$

La principale difficulté à laquelle nous sommes confrontés pour le calcul de la courbure est la précision de ce calcul. Dans le cadre de la méthode de la pseudo-concentration, la normale calculée est discontinue en raison de la normalisation décrite à la section précédente. Ces discontinuités sont localisées sur les éléments du maillage qui intersectent les lignes de niveaux $\phi(x) = \pm\epsilon$ et l'application de l'opérateur de divergence sur ces discontinuités est numériquement désastreux. De plus, si des techniques de régularisations sont utilisées pour l'application de l'opérateur de divergence, ces éléments sont impliqués dans un calcul effectué sur un voisinage et les problèmes numériques présents sur les discontinuités sont diffusés sur celui-ci. Nous proposons au chapitre suivant une méthodologie permettant de supprimer l'implication des « mauvais » éléments.

Nous cherchons à reconstruire le gradient sous la forme d'un champ vectoriel continu et plusieurs approches sont possibles pour respecter cette contrainte sur la reconstruction des dérivées. Une première approche possible, dont on peut par exemple retrouver l'utilisation dans Olsson et Kreiss (2005), revient à considérer une méthode de type Galerkin pour calculer la projection L_2 du gradient ∇F , que nous notons ici $\tilde{\nabla} F$, sur l'espace éléments-finis V_h^k :

$$\int_{\Omega} (\tilde{\nabla} F) \cdot \mathbf{v} dx = \int_{\Omega} \nabla(F_h) \cdot \mathbf{v} dx, \quad \forall \mathbf{v} \in V_h^k.$$

Le principal désavantage de cette méthode est son coût algorithmique et son coût mémoire puisqu'il faut résoudre un système linéaire global. Une autre alternative consiste à considérer cette même projection mais localement, c'est-à-dire sur un sous-domaine $\mathcal{B} \subset \Omega$,

$$\int_{\mathcal{B}} (\tilde{\nabla} F) \cdot \mathbf{v} dx = \int_{\mathcal{B}} \nabla(F_h) \cdot \mathbf{v} dx, \quad \forall \mathbf{v} \in V_h^k(\mathcal{B}).$$

Les opérateurs de projections locales sont largement utilisés. On retrouve par exemple cet outil mathématique dans les techniques de régularisation de fonctions discontinues (opérateurs de quasi-interpolation (Apel *et al.* (2000))), ou encore dans les estimations d’erreurs « a posteriori » (Zienkiewicz et Zhu (1987), Zienkiewicz et Zhu (1992)). Ces techniques se basent sur la résolution d’un problème de minimisation discret aux moindres carrés dont la solution est une fonction polynomiale $p_r \in P^r(\mathcal{B})$. Pour que ce problème de minimisation soit bien posé, il faut définir un certain nombre de points d’évaluation suffisamment distincts. Plusieurs stratégies sont possibles tant que l’ensemble des points choisis soient au moins au nombre de n_r , où n_r est la dimension de $P^r(\mathcal{B})$. La sélection des points d’évaluation et le choix de la pondération du problème aux moindres carrés mènent à différentes méthodes, que nous verrons dans la section suivante. Selon ces paramètres on retrouve principalement deux types de reconstruction locale de la fonction étudiée : soit une approximation polynomiale du développement de Taylor de la fonction, soit une décomposition de celle-ci dans une base orthonormale au sens donné par un produit scalaire défini sur $P^r(\mathcal{B})$. De plus, puisque dans cette thèse nous sommes amenés à travailler avec des fonctions éléments-finis discontinues, la formulation du problème aux moindres carrés doit pouvoir traiter de telles fonctions sans modification particulière.

Voici les critères sur lesquels nous nous basons pour définir des opérateurs de reconstruction de la normale et de la courbure de qualité qui nous permettront ensuite d’être en mesure de fournir une bonne discrétisation de la force volumique :

- fournir une approximation continue ;
- posséder des propriétés de convergence et le meilleur degré de précision possible ;
- détenir un niveau de bruit minimal ;
- ajuster automatiquement les paramètres de régularisation selon les paramètres du maillage.

1.4 La mise-à-jour de la variable eulérienne

L'utilisation des méthodes eulériennes de capture de l'interface nécessite la réinitialisation de la variable transportée permettant la capture de la surface libre. Lors de la résolution numérique de l'équation de transport, cette variable perd ses propriétés initiales, provoquant ainsi des problèmes de modélisation lors de l'évaluation des paramètres physiques et lors de l'imposition de la force volumique capillaire. La conséquence est une mauvaise conservation des quantités de volumes

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} H(\phi) d\Omega = 0.$$

Une première difficulté est de conserver une distribution régulière des isovaleurs de la variable eulérienne. Plusieurs auteurs se sont intéressés à ce problème difficile, et de nombreux travaux sont disponibles sur le sujet. Pour les méthodes de lignes de niveau utilisant la fonction distance signée, le problème est de conserver la norme suivante :

$$\|\nabla\phi(\mathbf{x}, t)\|_2 = 1.$$

Cette condition est discontinue sur certaines parties du domaine. Ces discontinuités correspondent aux axes médians des surfaces libres, c'est-à-dire les endroits se trouvant à égale distance de plus d'un point appartenant aux interfaces. Ces « chocs » peuvent poser des problèmes lorsque des changements de topologies s'opèrent ou encore lorsque le diamètre local d'une quantité de fluide devient très petit (filaments), comme nous l'avons mentionné à la section précédente pour le calcul de la normale et de la courbure.

Des techniques de mise-à-jour basées sur la résolution d'une équation de Hamilton-Jacobi (Osher et Sethian (1988), Sussman et Osher (1994), Fortin et Benmoussa (2006)), associées à une mise à l'échelle globale pour réinitialiser la fonction dis-

tance, sont disponibles pour traiter ce problème. Avec la méthode de la pseudo-concentration, le contrôle des oscillations peut s'effectuer en ajoutant à l'équation de transport un terme d'absorption non linéaire (Layton et Polman (1996)). Ce terme élimine les valeurs non physiques de la pseudo-concentration mais ne corrige pas la diffusion de la distribution des isovaleurs, et de plus cette approche n'est pas résiduelle. Olsson et Kreiss (2005) proposent la résolution d'une équation transitoire-stationnaire supplémentaire en ajoutant une compressibilité artificielle (Harten (1977), Olsson *et al.* (2007)). Ici encore la discrétisation obtenue n'est plus résiduelle. Ces approches sont coûteuses car elles nécessitent la résolution précise d'une équation supplémentaire. Elles atteignent également leurs limites lorsque des quantités de matière très différentes sont présentes dans une région donnée. Pour éviter de résoudre une équation supplémentaire, Devals et Bertrand (2004) proposent une technique différente qui consiste à appliquer un filtre en utilisant un changement de variable de l'équation de transport. Devals et Bertrand (2007) combinent ce filtre avec une technique simple, mais rudimentaire, de subdivisions locales pour adapter le maillage dans la zone de transition de la pseudo-concentration. Le problème avec cette approche est que la largeur de la zone de transition est difficilement contrôlable.

D'un autre côté, Marchandise et Remacle (2006) suggèrent d'approximer la ligne de niveau associée à la surface libre par des points sur l'interface pour ensuite construire une approximation de la fonction distance grâce à l'utilisation de la librairie ANN (Approximate Nearest Neighbors, Arya *et al.* (1998)). Cette librairie offre une complexité algorithmique avantageuse comparée à la résolution précise d'une équation supplémentaire. Le résultat obtenu est une construction explicite de l'interface par une paramétrisation linéaire par morceaux. Cette paramétrisation doit être orientée afin de pouvoir déterminer le signe de la projection orthogonale servant à calculer la distance à l'interface. Le problème est que le gradient de la

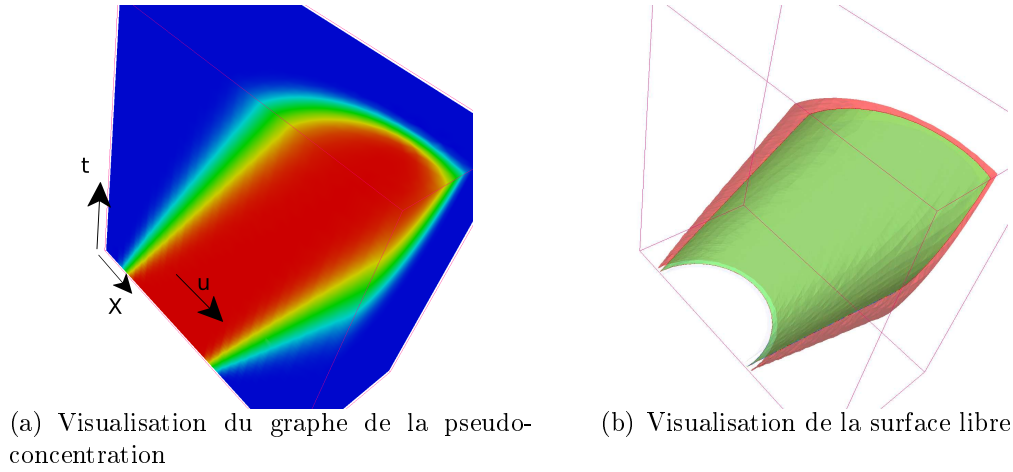


Figure 1.13: Illustration espace-temps de la diffusion de la zone de transition de la pseudo-concentration

distance signée interpolée contient les discontinuités de la normale paramétrée. Claisse et Frey (2008) proposent une méthodologie intéressante pour reconstruire une approximation implicite de l'interface à partir d'un nuage bruité de points. Le problème à résoudre pour obtenir cette reconstruction est bien posé puisqu'il s'appuie sur un problème de calcul variationnel. De plus, l'originalité de cette approche est d'inclure un processus d'adaptation anisotrope de la discrétisation spatiale, permettant ainsi d'obtenir des résultats numériques très précis.

Dans un premier temps, nous proposons une paramétrisation splinaire de la discrétisation de l'interface dans le but d'imposer la continuité de la normale. Cette procédure présente l'avantage d'être effectuée de manière locale, ce qui garantit une bonne conservation de la masse même lorsque des quantités de matière très différentes sont présentes dans une région donnée. Nous proposons une technique de mise-à-jour précise en incluant l'adaptation de maillage dans le but de contrôler l'erreur d'interpolation de la réinitialisation, et ainsi atteindre le deuxième objectif mentionné en introduction.

1.5 Les estimateurs d'erreurs

Nous introduisons ici les éléments de base qui sont inclus dans la méthodologie d'estimation d'erreur que nous proposons dans cette thèse. Deux catégories d'estimateurs sont considérées, les estimateurs d'erreur d'interpolation (a priori) et les estimateurs d'erreur variationnels applicables à l'équation de transport. Notre priorité est d'offrir une méthodologie d'estimation d'erreur pour la pseudo-concentration.

1.5.1 Les erreurs d'interpolation pour la pseudo-concentration

Parmi ceux retenant notre attention se trouve l'estimateur d'erreur d'interpolation pour son indépendance vis-à-vis des équations étudiées. Contrôler l'erreur d'interpolation permet de contrôler l'erreur d'approximation (cf. lemme de Céa). Très succinctement, l'erreur d'interpolation de degré k est caractérisée par les dérivées d'ordre $k + 1$ de la fonction scalaire considérée. L'estimation discrète de l'erreur d'interpolation nécessite la reconstruction des dérivées partielles (Anglada *et al.* (1999), Manzi *et al.* (2000)) et permet de définir aisément une carte de tenseurs métriques servant à gouverner les algorithmes d'adaptation de maillage (Berzins (1997)). De nombreux travaux ont été réalisés dans le but de générer des maillages optimaux afin d'équidistribuer l'erreur d'interpolation (Vallet *et al.* (1991), Vallet (1992), Huang (2006), Lague (2006)). Cet estimateur est facile d'utilisation et il est éprouvé car il a fait l'objet de nombreuses études dans le contexte des simulations numériques par éléments finis (Baker (1997), Habashi *et al.* (1997), Habashi *et al.* (1998), Kunert (2002)). Bien que nous utilisions principalement des interpolants quadratiques, nous nous restreindrons au cas de l'estimation de l'erreur

d'interpolation linéaire qui, sur un élément, s'exprime sous la forme

$$\|f - I_h^1 f\|_{K,\infty} \leq \frac{2}{9} \mathbf{h}^T \sqrt{\mathbf{M}^T \mathbf{M}} \mathbf{h}, \quad \mathbf{h} \subset K,$$

où $\mathbf{M} = \nabla^2 f$, et \mathbf{h} représente le plus grand vecteur qui peut être contenu dans l'élément K . Les estimateurs d'erreurs d'interpolation sont utilisés pour l'ensemble des variables du problème comprenant les variables de l'écoulement (champ de vitesse et pression) ainsi que la variable eulérienne qui est solution de l'équation de transport et sur laquelle nous voulons nous concentrer en appliquant des estimateurs spécifiques. Puisque la représentation de la surface libre est implicite, il est naturel de s'intéresser à la qualité de l'approximation de l'interface par une isovaleur donnée d'une fonction discrète. Claisse *et al.* (2009) ont formalisé ce problème par un calcul variationnel et obtiennent un estimateur d'erreur a priori pour l'approximation linéaire de la fonction distance signée :

$$\|\Gamma - \Gamma_h^1\|_{K,\infty} < C(\kappa)\eta,$$

où Γ_h^1 représente l'isosurface de valeur nulle de l'interpolation linéaire de la distance signée. La borne de l'erreur $C(\kappa)$ est fonction d'une taille minimum $h_n = \frac{1}{\eta^2}$ des éléments dans la direction de la normale à l'interface et d'une taille minimum $h_t = \sqrt{\frac{\eta}{\kappa}}$ dans la direction de la tangente.

Ces estimateurs permettent de connaître « a priori » deux informations sur les propriétés que le maillage doit satisfaire pour discrétiser convenablement la pseudo-concentration. La première information est une condition de taille minimum des éléments, en fonction de la courbure, dans un voisinage de la surface libre. La seconde information est une information directionnelle basée sur le repère de Fresnet $(\mathbf{n}_\Gamma, \mathbf{t}_\Gamma)$. Si on veut contrôler l'erreur d'interpolation de la discrétisation implicite

de l'interface, on doit proposer un maillage satisfaisant ces critères de taille et de direction. Il est alors indispensable de posséder deux quantités : la normale et la courbure à la surface libre.

La normale et la courbure de l'interface sont les quantités centrales de notre méthodologie conçue pour simuler numériquement les problèmes à surface libre. Ces informations sont indispensables pour :

- formuler le modèle CSF de la tension superficielle ;
- calculer une borne de l'erreur d'interpolation de l'interface ;
- imposer adéquatement la taille et la forme des éléments dans un voisinage de l'interface.

1.5.2 Les estimateurs d'erreur pour l'équation de transport

Une deuxième technique dont nous nous inspirons s'appuie sur la formulation variationnelle de l'erreur de l'équation de transport. On retrouve notamment cette approche dans les travaux de Zaki *et al.* (1994), Krivodonova et Flaherty (2003) et de Flaherty et Remacle (2002). Celle-ci nécessite de résoudre une équation hyperbolique supplémentaire et nous utilisons pour cela la méthode de Galerkin discontinue. Cette méthode s'avère souple et performante en coût mémoire et en complexité algorithmique puisque la résolution s'effectue élément par élément. En particulier, nous profitons du fait qu'il est aussi possible d'obtenir des indicateurs d'erreurs aussi efficaces et moins coûteux en utilisant des bases polynomiales hiérarchiques (Zaki *et al.* (1994)), ou des bases polynomiales orthonormées (Lang et Walter (1995)). Pour compléter la présentation des estimateurs d'erreurs a posteriori de l'équation de transport, et particulièrement pour les problèmes stationnaires, nous nous intéressons à estimer l'erreur de quantités d'intérêts dépendantes de la solution. Ce type d'estimation est connu sous le nom de « Goal-Oriented Error Estimation » et

fait l'objet de nombreuses recherches. Houston *et al.* (2002) proposent un estimateur d'erreur basé sur la formulation du problème dual de l'équation de transport. Bien qu'il nécessite de résoudre une équation de transport de plus et d'en estimer l'erreur, ce qui constitue un effort de calcul non négligeable, cette technique offre une estimation *asymptotiquement exacte* de l'erreur, ce qui peut être nécessaire pour estimer la fiabilité des résultats. Avec l'emploi des méthodes de Galerkin discontinues, il apparaît raisonnable d'utiliser un tel estimateur. Il faut noter que le problème dual est souvent radicalement différent du problème primal et pour que cet estimateur soit efficace, le problème dual et son erreur d'approximation doivent être calculés avec précision. C'est pourquoi plusieurs auteurs suggèrent que la résolution du problème dual s'effectue sur un second maillage. Pour leurs généralités et leurs informations tensorielles, les estimateurs d'erreurs d'interpolation sont introduits pour traiter l'ensemble des variables du problème considéré. Peu de travaux sont disponibles sur la validité de ces estimateurs pour les équations hyperboliques. On retrouve également peu d'études concernant l'impact de l'anisotropie sur les estimateurs d'erreur a posteriori applicables à l'équation de transport (Zaki *et al.* (1994), Xiangrong et Shephard (2004), Krivodonova et Flaherty (2003), Houston *et al.* (2002)). Nous proposons un estimateur d'erreur où nous combinons l'approche proposée par Houston *et al.* (2002) avec les estimateurs variationnels (Zaki *et al.* (1994)) appliqués aux problèmes primal et dual de l'équation de transport. Cette approche, dont l'originalité est d'utiliser un unique maillage pour discrétiser les deux problèmes, donne d'excellents résultats et nous proposons une stratégie d'estimation d'erreur basée sur les estimateurs d'erreur d'interpolation et sur les estimateurs d'erreur retenus pour l'équation de transport (Zaki *et al.* (1994), Houston *et al.* (2002)). L'impact de l'anisotropie sur ces estimateurs est étudié afin de mieux comprendre leurs comportements dans une stratégie de remaillage non structuré.

1.6 L'adaptation de maillage

L'adaptativité est maintenant devenue un élément de base de la discrétisation des équations aux dérivées partielles. Deux outils complémentaires sont nécessaires : un indicateur d'erreur a posteriori qui indique où raffiner et déraffiner le maillage et un remailleur dont le rôle est de fournir un maillage satisfaisant les critères de formes demandés. Nous travaillons principalement avec des méthodes de modifications locales, c'est-à-dire que ces méthodes ne consistent pas à reconstruire entièrement le maillage. La notion de taille des éléments est caractérisée par un tenseur métrique, spécifiant dans chaque direction la taille que chaque élément du maillage doit respecter. Une carte de métrique est un champ de tenseurs métriques défini sur le domaine Ω qui permet de gouverner la construction de maillages isotropes et anisotropes. La nature des informations requises par le remailleur est donc tensorielle. Parmi les techniques d'adaptation de maillage, on retrouve principalement deux types de méthodes : les subdivisions locales et le remaillage. Les méthodes de subdivisions locales présentent l'avantage d'être simples mais manquent de flexibilité et ne peuvent offrir des maillages dits optimaux (Babuška et Rheinboldt (1978)) au sens de la distribution et de la densité des noeuds du maillage. Ces méthodes conservent la forme (de la majorité) des éléments, c'est-à-dire que le ratio des éléments subdivisés ainsi que la direction de l'étirement sont invariants. Pour cette raison, l'utilisation de ces méthodes est le plus souvent liée à une étude de convergence de la précision numérique des algorithmes.

Nous préférons les algorithmes de remaillage (George et Borouchaki (1997), Frey et Alauzet (2003), Tchon *et al.* (2006)) où la notion de taille des éléments est caractérisée par une carte de tenseurs métriques, spécifiant en tout point du domaine et pour chaque direction la taille que les éléments du maillage doivent respecter. Les méthodes de remaillage sont plus complexes à mettre en œuvre mais offrent

une meilleure flexibilité et une qualité nettement supérieure du maillage adapté, et permettent aussi l'utilisation de maillages anisotropes tout en ayant la capacité de traiter des géométries complexes.

La méthodologie d'adaptativité de maillage se divise en deux parties, chacune d'elles traitant des problèmes stationnaires et des problèmes instationnaires. Pour la stratégie d'adaptativité appliquée aux problèmes stationnaires, notre choix se porte sur les méthodes de point fixe auxquelles les laboratoires de l'INRIA ont largement contribué. Ces méthodes se traduisent par la recherche d'une variable d'état stationnaire dans la boucle d'adaptativité, cette variable d'état comprenant le maillage et les variables discrétisées sur celui-ci. C'est un schéma classique d'adaptativité qui ne comprend pas de réelles difficultés hormis le choix des estimateurs d'erreurs et la reformulation sous forme tensorielle des indicateurs d'erreurs.

Les schémas classiques d'adaptation de maillage, comme les méthodes de point fixe appliquées à des problèmes stationnaires, sont inadaptés pour des problèmes transitoires (Mohammadi et Hecht (2001), Alauzet *et al.* (2003)). À l'opposé des méthodes lagrangiennes, les méthodes eulériennes de capture de l'interface s'appliquent sur un maillage fixe. Celui-ci doit donc être défini de façon à ce que, pour un intervalle de temps donné, l'ensemble des variables ayant le temps comme variable indépendante soient convenablement discrétisées. Alauzet *et al.* (2007) proposent une extension du schéma classique en choisissant une stratégie de point fixe afin que l'erreur d'interpolation soit bornée pour toutes les solutions définies sur une période de temps donnée. Ils introduisent la notion de temps caractéristique du maillage qui définit l'intervalle de temps pour lequel le critère sur l'erreur d'interpolation reste valide. Chaque itération du processus d'adaptativité induit un changement de discrétisation et de connectivité qui crée une erreur de phase due à l'interpolation des solutions numériques sur le nouveau maillage, comme cela est expliqué dans Mohammadi et Hecht (2001). Pour minimiser le nombre d'interpolations effectuées, on peut soit

augmenter l'intervalle de temps caractéristique du maillage, ce qui revient à augmenter le nombre de solutions en temps prises en compte, soit se concentrer sur les méthodes d'interpolation. Peu de travaux sont disponibles sur l'impact du choix des méthodes d'interpolation. Notons que pour des variables linéaires, Mehrenberger et Alauzet (2006) proposent une méthode conservative basée sur l'intersection de maillages.

Fortin et Benmoussa (2006) proposent une stratégie d'adaptativité de maillage lorsque les équations sont résolues de façon découplée en adaptant le maillage systématiquement à chaque pas de temps. Pour assurer la convergence de la résolution découplée, l'utilisation de très petits pas de temps est privilégiée afin que les variables soient interpolées convenablement à chaque itération pour capturer correctement le phénomène physique. Dans ce cas, le nombre de phases d'adaptation du maillage et le nombre d'interpolations effectuées sont très importants. Notons également que le nombre d'itérations de résolutions numériques découplées pour atteindre la convergence étant plus important que pour une résolution couplée, nous pensons que l'économie de calculs réalisée en utilisant une méthode découplée n'est pas significative.

1.6.1 La métrique

Définition 1.3 *Un tenseur métrique, ou métrique, est une matrice symétrique définie positive $\mathbf{M} \in \mathbb{S}_2(\mathbb{R})$, où $\mathbb{S}_2(\mathbb{R})$ désigne l'ensemble des matrices symétriques définies positives de dimension 2.*

La propriété de positivité d'une métrique permet de définir un produit scalaire induit par cette dernière. Le produit scalaire de deux vecteurs relativement à la

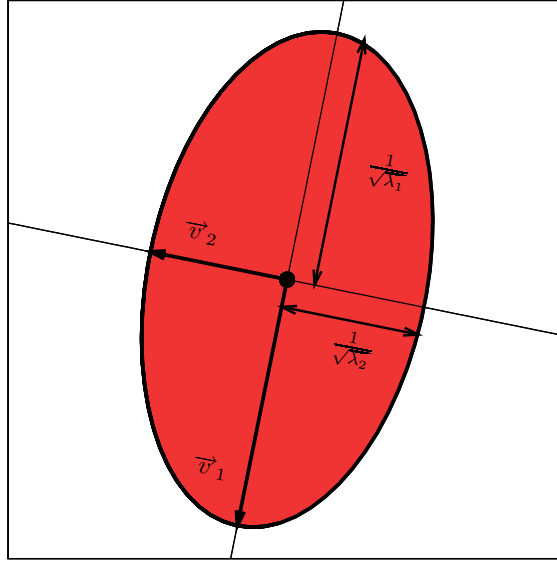


Figure 1.14: Caractérisations du tenseur métrique

métrique \mathbf{M} est donné par

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_M = \mathbf{u}^T \mathbf{M} \mathbf{v},$$

et la norme induite par celui-ci est donnée par

$$\|\mathbf{v}\|_M = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle_M},$$

qui n'est autre que la longueur du vecteur \mathbf{v} dans la métrique \mathbf{M} . Notons que nous retrouvons les définitions du cas euclidien en posant $\mathbf{M} = \mathbf{I}$, \mathbf{I} étant la matrice identité.

Le tenseur métrique étant symétrique, celui-ci est diagonalisable, c'est-à-dire que \mathbf{M}_P admet une décomposition en valeur singulière sous la forme

$$\mathbf{M} = \mathbf{V} \mathbf{D} \mathbf{V}^t = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 \end{pmatrix}^t, \quad (1.72)$$

où \mathbf{V} est la matrice unitaire formée par les vecteurs propres \mathbf{v}_1 et \mathbf{v}_2 , et \mathbf{D} est la matrice diagonale contenant les valeurs propres λ_1 et λ_2 . Notons que cette décomposition, qui n'est pas unique, est essentielle et est à la base de la quasi-totalité des opérateurs disponibles sur les métriques.

Le tenseur métrique se caractérise géométriquement par sa boule unité

$$B_M = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid \|\mathbf{x}\|_M \leq 1\}.$$

La frontière de B_M , ou la sphère unité, décrit une ellipse centrée à l'origine dont les axes principaux sont donnés par les vecteurs propres de \mathbf{M} et les longueurs des demi-axes par la racine carrée de l'inverse des valeurs propres correspondantes (cf. figure 1.14), i.e. $h_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}$.

Introduisons une autre décomposition dont les éléments de la matrice diagonale correspondent à l'étirement de l'élément

$$\mathbf{M} = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2} \mathbf{V} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_2}} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T = d_M \mathbf{V} \begin{pmatrix} r_M & 0 \\ 0 & r_M^{-1} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T, \quad (1.73)$$

où d_M est le déterminant de M et r_M est le quotient anisotropique : $r_M = \frac{h_1}{h_2}$.

La notion de maillage unité

Définition 1.4 *Une métrique continue \mathcal{M} est une application continue qui en chaque point \mathbf{a} définit un espace métrique euclidien $(\mathbb{R}^2, \mathbf{M}(\mathbf{a}))$:*

$$\begin{aligned} \mathcal{M} : \Omega &\longrightarrow \mathbb{S}_2 \\ \mathbf{a} &\longmapsto \mathcal{M}(\mathbf{a}) = \mathbf{V}(\mathbf{a}) \begin{pmatrix} \lambda_1(\mathbf{a}) & 0 \\ 0 & \lambda_2(\mathbf{a}) \end{pmatrix} \mathbf{V}(\mathbf{a})^T. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Une métrique discrète est simplement une interpolation de la métrique continue évaluée aux sommets du maillage. La notion de métrique continue permet de substituer une métrique à un maillage, dans le sens où une métrique permet de paramétrer un maillage, et définit ainsi une classe d'équivalence entre les maillages qui satisfont cette paramétrisation. L'esthétique d'un maillage n'est pas un critère de qualité supérieure vis-à-vis d'un autre maillage unité.

La densité d'une métrique est un indicateur de la concentration locale des noeuds, et la complexité est une mesure globale de cette concentration qui s'exprime sous la forme

$$\mathcal{C}(\mathcal{M}) = \int_{\Omega} d_{\mathcal{M}} d\Omega = \int_{\Omega} \sqrt{|\mathcal{M}(\mathbf{x})|} d\Omega. \quad (1.75)$$

Un maillage \mathcal{T} est dit « unité » relativement à une métrique \mathcal{M} si les arêtes du maillage sont toutes de longueur unité dans cette métrique. En pratique, cette condition est moins restrictive et un maillage est considéré comme un maillage unité si pour chacune de ses arêtes \mathbf{e} :

$$1 - \epsilon \leq l_M(\mathbf{e}) \leq 1 + \epsilon, \quad \epsilon > 0,$$

où $l_M(\mathbf{e})$ est la longueur d'une arête \mathbf{e} dans la métrique \mathcal{M} . Cette longueur est calculée comme la distance entre ses extrémités \mathbf{a} et \mathbf{b} , et est donnée par

$$l_{\mathcal{M}}(\mathbf{e}) = \int_0^1 \sqrt{\mathbf{e}^T \mathcal{M}(\mathbf{a} + t\mathbf{e}) \mathbf{e}} dt. \quad (1.76)$$

Remarque 1.4 Si on prend une métrique $\mathcal{M}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta_x^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Delta_y^2} \end{pmatrix}$ définie sur un

domaine $\Omega = [0, 1]^2$, alors la complexité de cette métrique est donnée par

$$\mathcal{C}(\mathcal{M}) = \frac{1}{\Delta_x \Delta_y} \approx N,$$

N étant le nombre de noeuds d'un maillage unité dans cette métrique.

De nombreux travaux sur la construction et la modification d'une carte de métriques ont été réalisés pour prendre en compte différentes contraintes (Borouchaki et Frey (1998), Alauzet (2003), Xiangrong et Shephard (2004)). On dispose ainsi d'opérateurs comme l'interpolation, l'intersection ou encore le lissage de métriques, l'objectif étant d'assurer la qualité et la régularité du maillage final vis-à-vis du problème aux dérivées partielles considéré.

L'opération d'intersection de métriques

Le plus souvent, la simulation d'un problème aux dérivées partielles nous amène à considérer plusieurs variables. Dans le cas où plusieurs métriques sont spécifiées en un même sommet du maillage, on cherche alors à définir une unique métrique représentative de toutes ces métriques. Ceci introduit la notion d'intersection de métriques qui repose sur la caractérisation géométrique du tenseur. Une illustration graphique est proposée à la figure 1.15(a) dans le cas de l'intersection de deux métriques, et à la figure 1.15(b) dans le cas de l'intersection de trois métriques.

Soient \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 deux tenseurs métriques représentés par leurs ellipses ξ_{M_1} et ξ_{M_2} . Le tenseur résultant de l'intersection des métriques \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 se caractérise par une ellipse ξ_M de surface maximale (de volume maximal en dimension 3) incluse dans l'intersection géométrique des ellipses ξ_{M_1} et ξ_{M_2} . Celle-ci est obtenue grâce à la réduction simultanée des formes quadratiques associées aux produits scalaires

définis par les deux métriques \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 (George et Borouchaki (1997), Alauzet (2003)). Pour cela, il faut trouver une base $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ telle que \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 soient toutes deux diagonales, et la base $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ recherchée est alors donnée par les vecteurs propres de $\mathbf{N} = \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M}_2$:

$$\mathbf{V}_N = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2).$$

Les valeurs propres de \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 dans cette base se déterminent à l'aide du quotient de Rayleigh : $\lambda_i = \|\mathbf{e}_i\|_{\mathbf{M}_1}^2$, et $\nu_i = \|\mathbf{e}_i\|_{\mathbf{M}_2}^2$ pour $i = 1, 2$. On obtient alors $\mathbf{M}_1 = V_N^{-T} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} V_N^{-1}$ et $\mathbf{M}_2 = V_N^{-T} \begin{pmatrix} \nu_1 & 0 \\ 0 & \nu_2 \end{pmatrix} V_N^{-1}$, pour finalement définir l'intersection par

$$M = \mathbf{M}_1 \cap \mathbf{M}_2 = V_N^{-T} \begin{pmatrix} \max(\lambda_1, \nu_1) & 0 \\ 0 & \max(\lambda_2, \nu_2) \end{pmatrix} V_N^{-1}. \quad (1.77)$$

Remarque 1.5 Prenons le cas où \mathbf{N} possède une valeur propre double, notée α . Si $\alpha \leq 1$, nous avons $\mathbf{M}_1 \cap \mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_1$ et si $\alpha > 1$ alors $\mathbf{M}_1 \cap \mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_2$. L'une des deux ellipses est toujours incluse dans l'autre.

Remarque 1.6 Cette méthode nécessite l'identification de plusieurs cas dont celui où $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2$. En effet, sans traitement particulier on a $\mathbf{M}_1 \cap \mathbf{M}_1 \neq \mathbf{M}_1$.

McKenzie *et al.* (2009) proposent une autre méthode d'intersection qui ne possède pas cet inconvénient. Cette dernière méthode peut être considérée comme plus robuste et est la méthode d'intersection de métriques que nous utilisons dans cette thèse. Cette méthode est décrite au chapitre 4.

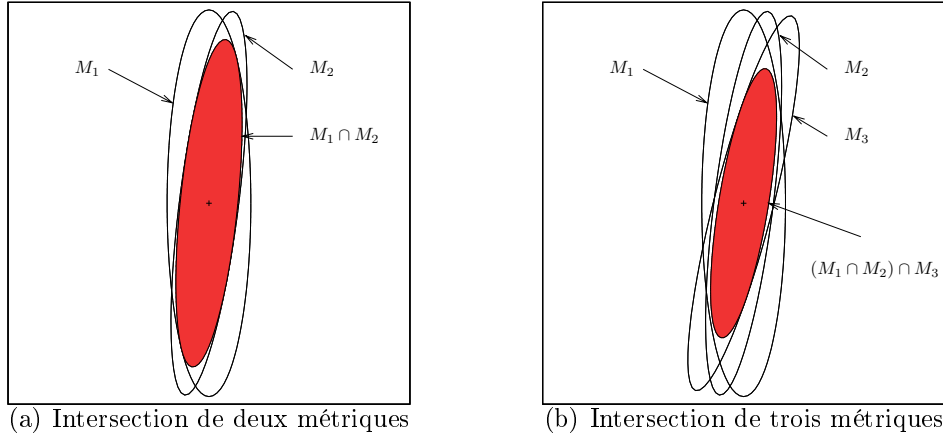


Figure 1.15: Illustration de l'intersection de métriques

Le lissage de métriques

Lorsqu'une métrique possède des variations de tailles (ou de directions) trop importantes, il s'avère utile de lisser cette métrique dans le but d'obtenir des transitions plus régulières tout en conservant les principales caractéristiques des extrémaux locaux. Parmi les premiers travaux concernant le lissage de métrique, on retrouve la méthode proposée par Borouchaki où sont définies les notions de H-shock. C'est un lissage principalement appliqué sur les tailles. Xiangrong et Shephard (2004) étendent ces notions et proposent une méthode munie d'un lissage directionnel de la métrique. Nous invitons le lecteur à consulter l'état de l'art et les techniques de lissage dont les travaux de Alauzet (2010) font l'objet.

1.6.2 Le point fixe d'adaptation de maillage

Nous considérons un problème qui consiste à résoudre un système d'équations aux dérivées partielles, noté \mathcal{P} , défini sur le domaine Ω . Soit \mathcal{T} une triangulation de Ω , et \mathcal{S} une solution discrète de type éléments-finis du problème discrétisé \mathcal{P}_h de \mathcal{P} . Ainsi, au maillage \mathcal{T} correspond une discretisation $\Phi(\mathcal{T}, \cdot)$ du problème discret \mathcal{P}_h ,

et le problème \mathcal{P}_h est résolu lorsque la solution $\mathcal{S}(\mathcal{T})$ vérifie

$$\Phi(\mathcal{T}, \mathcal{S}(\mathcal{T})) \approx 0. \quad (1.78)$$

Cas stationnaire

L'application de l'algorithme classique de remaillage appliqué à un problème stationnaire consiste à calculer une suite de maillages/solutions $(\mathcal{T}_j, \mathcal{S}_j)$. Un indicateur d'erreur *a posteriori*, noté \mathcal{E}_j , est calculé à partir de \mathcal{S}_j . Basée sur cet indicateur d'erreur, une carte de métrique \mathcal{M}_j est construite afin de contrôler les algorithmes de remaillage. Le maillage \mathcal{T}_j est modifié pour donner naissance au maillage \mathcal{T}_{j+1} et une nouvelle solution \mathcal{S}_{j+1} est recalculée sur celui-ci. Finalement, la boucle d'adaptation prend fin lorsqu'une mesure de la convergence du point fixe $\|\mathcal{S}_{j+1} - \mathcal{S}_j\| < \epsilon$ est satisfaite. Ainsi, l'objectif d'une stratégie de remaillage est de calculer une suite de couples maillage/solution

$$(\mathcal{T}_{j+1}, \mathcal{S}_{j+1}) = \mathcal{G}(\mathcal{T}_j, \mathcal{S}_j) \quad (1.79)$$

où le couple $(\mathcal{T}_j, \mathcal{S}_j)$ satisfait les équations du problème discret (1.78). La fonctionnelle \mathcal{G} consiste à construire un nouveau maillage et à recalculer une solution discrète sur celui-ci. Cette stratégie peut être résumée par l'algorithme 1, et la figure 1.16 est une représentation graphique de ce schéma.

Dans cet algorithme, on note \mathcal{T}_I le maillage initial et \mathcal{T}_F le maillage final adapté. Les solutions sont notées \mathcal{S}^i , i indiquant une correspondance au i^e recalcul. L'indice f signifie « final ». La relation de parenthèses $A(B)$ signifie que A est définie sur B . On se donne un nombre maximum d'itérations d'adaptation N_{max} , ainsi qu'une tolérance ϵ fixée.

Algorithme 1 Boucle d'adaptativité stationnaire

ENTRÉES: le maillage initial \mathcal{T}_I , le nombre maximum d'itérations N_{max} , la tolérance sur l'erreur ϵ .

SORTIES: le maillage final \mathcal{T}_F et la solution discrète $\mathcal{S}_F(\mathcal{T}_F)$ des équations régissant l'écoulement.

- $\mathcal{T}_0 \leftarrow \mathcal{T}_I$
- Calculer la solution discrète $\mathcal{S}_0(\mathcal{T}_0)$ des équations
- Estimer les erreurs de $\mathcal{S}_0(\mathcal{T}_0)$

- $i \leftarrow 1$
- tantque** $i \leq N_{max}$ *ET* erreurs $> \epsilon$ **faire**
 - Construire une carte de métrique $\mathcal{H}_{i-1}(\mathcal{S}_{i-1}, \mathcal{T}_{i-1})$
 - Construire un nouveau maillage $\mathcal{T}_i(\mathcal{T}_{i-1}, \mathcal{H}_{i-1})$
 - Calculer la solution discrète $\mathcal{S}_i(\mathcal{T}_i)$ des équations
 - Estimer les erreurs de $\mathcal{S}_i(\mathcal{T}_i)$

$i \leftarrow i + 1$

fin tantque

- $\mathcal{T}_F \leftarrow \mathcal{T}_{i-1}$
 - $\mathcal{S}_F \leftarrow \mathcal{S}_{i-1}$
-

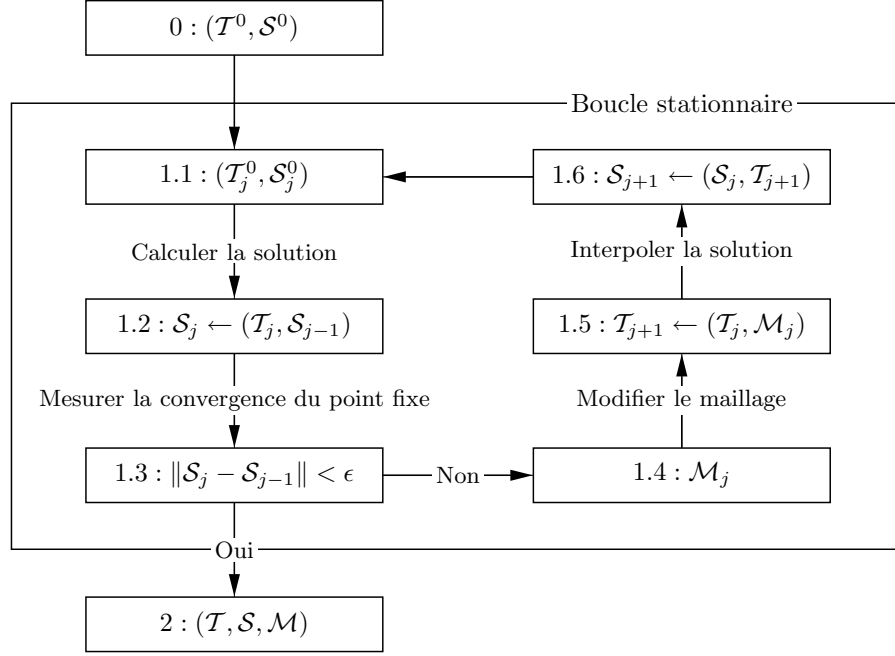
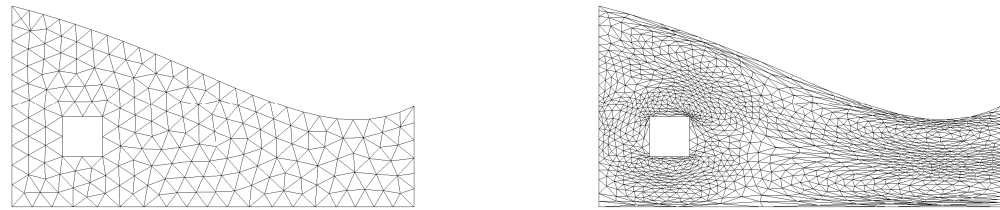


Figure 1.16: Boucle d'adaptation de maillage stationnaire

Notons enfin qu'il serait judicieux de redéfinir la solution \mathcal{S}_j sur le maillage \mathcal{T}_{j+1} afin de proposer une approximation initiale convenable de \mathcal{S}_{j+1} lors de la résolution du système d'équations (1.78). Pour cela il est nécessaire de procéder à une interpolation de la solution \mathcal{S}_j sur le nouveau maillage \mathcal{T}_{j+1} . Cette étape n'est pas simple et nous reviendrons sur ce point au chapitre qui traite l'adaptation de maillage.

Une simple illustration permet d'apprécier la puissance de l'adaptation de maillage sur un problème de Stokes stationnaire sans interface. La condition au bord gauche (entrée) est imposée par un profil de vitesse parabolique, la condition au bord droit (sortie) est une condition de Neumann nulle. Le champ de vitesse est nul sur le reste du bord. La figure 1.17(a) représente un maillage isotrope initial \mathcal{T}_I suffisamment grossier et pris pour maillage de départ, et la figure 1.17(b) représente le maillage anisotrope final \mathcal{T}_F . Les lignes de niveaux du champ de vitesse sont illustrées à la figure 1.17(c) et les lignes de niveaux de la pression sont illustrées à la figure



(a) Maillage non adapté

(b) Maillage adapté

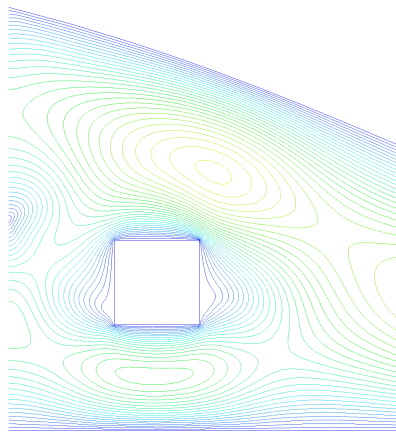
(c) \mathbf{u} (d) p

Figure 1.17: Illustration de l'application de l'adaptation de maillage anisotrope sur un problème de Stokes : (c) isovaleurs du champ de vitesse \mathbf{u} sur le maillage adapté, (d) isovaleurs de la pression p sur le maillage adapté

1.17(d). On remarque que ces deux dernières figures affichent des variables de la solution \mathcal{S}_F particulièrement bien discrétisées.

Cas transitoire

Nous présentons dans cette section l'algorithme d'adaptation de maillage transitoire. Le lecteur peut se référer à Alauzet *et al.* (2007) pour de plus amples détails.

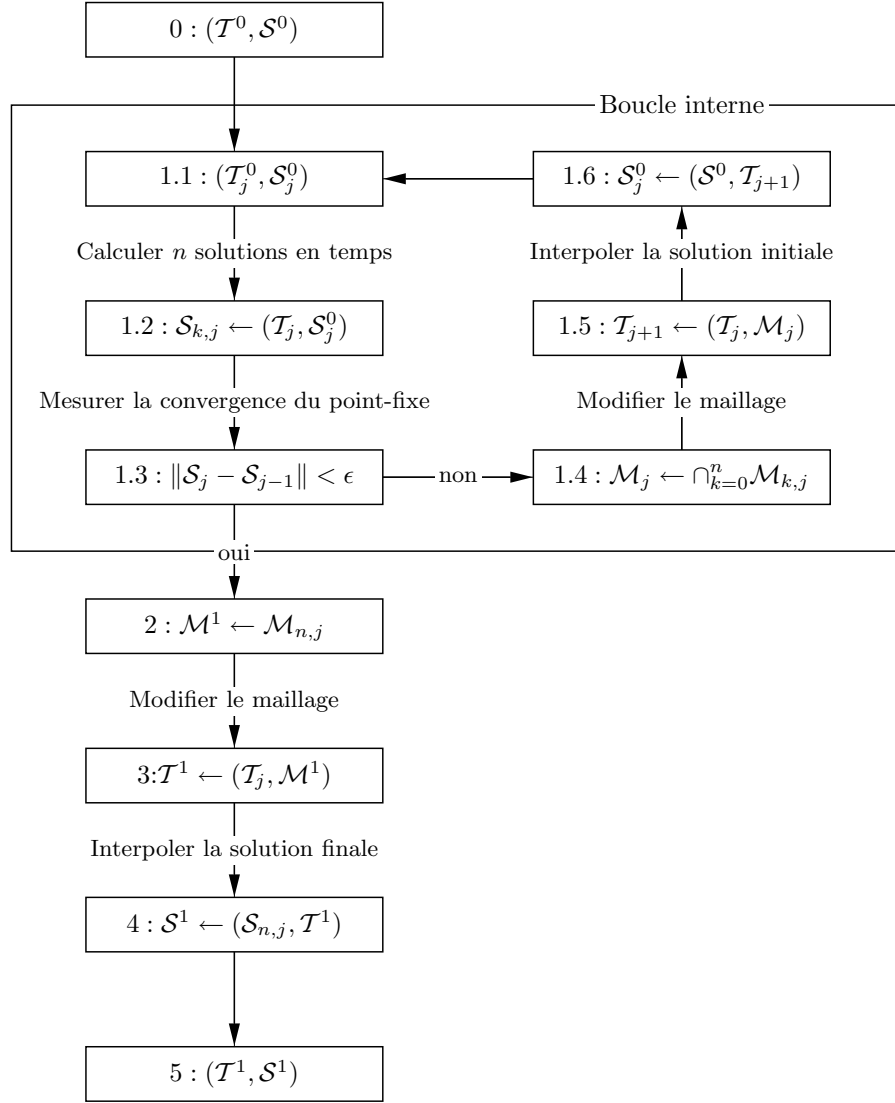


Figure 1.18: Boucle d'adaptation de maillage transitoire

Pour le cas transitoire, l'application de l'algorithme de point fixe se concentre sur un intervalle de temps $I = [t_0, t_1]$, où n solutions sont calculées aux temps t_i :

$$(\mathcal{S}_{j+1}^0, \mathcal{S}_{j+1}^1, \dots, \mathcal{S}_{j+1}^n, \mathcal{T}_{j+1}) = \mathcal{G}(\mathcal{T}_j, \mathcal{S}_j^0, \mathcal{S}_j^1, \dots, \mathcal{S}_j^n). \quad (1.80)$$

Nous notons $(\mathcal{T}^0, \mathcal{S}^0)$ le couple maillage/solution au temps t_0 , i.e. la condition initiale du problème sur la période $I = [t_0, t_1 = t_0 + n\Delta t]$, $n \geq 1$ (étape 0). L'objectif est de construire une suite de couples maillage/solution $(\mathcal{T}_j^0, \mathcal{S}_j^0)$ qui converge vers le couple maillage/solution $(\mathcal{T}^1, \mathcal{S}^1)$ défini au temps t_1 . Nous allons décrire les étapes algorithmiques nécessaires pour atteindre cet objectif, le but étant d'adapter la discrétisation spatiale où la solution transitoire évolue. Cet algorithme est illustré à la figure 1.18.

À partir d'un sous-ensemble de solutions $\mathcal{S}_{k,j}^0$ obtenues sur la période I (étape 1.2), un ensemble de cartes de métriques $\mathcal{M}_{k,j}$ est calculé (étape 1.4). Ces cartes de métriques sont ensuite unifiées en utilisant une procédure d'intersection (Borouchaki *et al.* (1997), Dompierre et McKenzie (2009)) pour donner une unique métrique \mathcal{M}_j^0 représentative de l'évolution des caractéristiques du maillage sur la période I . En se basant sur \mathcal{M}_j^0 , le maillage \mathcal{T}_{j+1} est construit (étape 1.5), puis la solution initiale \mathcal{S}^0 (définie sur le maillage \mathcal{T}^0) est interpolée sur le maillage nouvellement construit \mathcal{T}_{j+1} pour obtenir \mathcal{S}_{j+1}^0 (étape 1.6). La nouvelle condition initiale \mathcal{S}_{j+1}^0 permet ainsi de recalculer les solutions sur la période de temps (étape 1.1). Lorsqu'une tolérance adéquate de $\|\mathcal{S}_{j+1} - \mathcal{S}_j\|$ est satisfaite (étape 1.3), les solutions sont considérées ne plus différer d'une itération à l'autre et la convergence du point fixe adaptatif est atteinte. Ceci est la description de la boucle interne de l'algorithme de point fixe transitoire, généralisé et proposé par Alauzet *et al.* (2007).

Après convergence, i.e. à la fin de la première étape, un nouveau maillage \mathcal{T}^1 est généré pour la solution au temps t_1 en se basant sur la métrique \mathcal{M}_n^0 définie au temps t_1 (étapes 2 et 3). Enfin, l'étape 4 est une étape d'interpolation pour obtenir le couple maillage/solution $(\mathcal{T}^1, \mathcal{S}^1)$ dont le résultat constitue l'étape 5.

Chaque itération de la boucle interne d'adaptation se termine par une étape d'interpolation (étape 1.6) pour permettre le recalcul des solutions en temps sur la

période I . La méthode la plus simple consiste à effectuer une évaluation directe de la solution à interpoler aux valeurs nodales du nouveau maillage. Certaines méthodes de localisation, telles que les arbres digitaux alternés (ADT), offrent une complexité algorithmique peu coûteuse mais requièrent un espace mémoire non négligeable. D'autres approches, telles que proposées par Alauzet (2011), se basent sur les relations d'adjacences des éléments. Ces approches sont plus complexes dans le sens où plusieurs cas pathologiques complexifient leurs mises en œuvre, mais offrent l'avantage de posséder un coût mémoire quasi-nul. Notons que la suite de maillages \mathcal{T}_j^0 doit pouvoir discrétiser convenablement la solution initiale \mathcal{S}^0 (et non pas \mathcal{S}_{j-1}^0) pour appliquer l'étape 1.1. En admettant une relation d'équivalence entre le maillage et la carte de métrique qui a servi à construire celui-ci, on peut répondre à cette exigence par l'interpolation de la métrique \mathcal{M}^0 sur le maillage \mathcal{M}_j^0 ou bien par le recalcul de la métrique \mathcal{M}^0 en se basant sur la solution \mathcal{S}_j^0 . Cependant, l'interpolation d'un champ de tenseurs symétriques définis positifs est une question délicate que nous n'abordons pas dans cette thèse, mais qui pourrait être l'objet de travaux futurs.

Pour traiter les problèmes transitoires, le schéma d'adaptativité proposé par Alauzet *et al.* (2007) a pour rôle de prédire l'évolution de la solution et d'effectuer une adaptation du maillage dans les régions où les phénomènes physiques évoluent. Nous proposons de modifier ce schéma en incluant un prédicteur temporel de la variable de transport, qui permet d'ajuster a priori la densité de maille là où la surface libre est censée évoluer. L'utilisation des méthodes de Galerkin discontinues et des techniques d'approximation de l'interface proposées par Remacle *et al.* (2007) permettent d'obtenir un prédicteur efficace et peu coûteux. La qualité du schéma d'adaptativité transitoire dépend aussi de la qualité des méthodes d'interpolation qui, si non convenablement choisies, soulèvent entre autres des problèmes de déphasage et de conservation de la matière. Afin de solutionner ou de contour-

ner les problèmes provoqués par les méthodes d'interpolation, notre objectif est de proposer un schéma d'adaptivité transitoire plus spécifique à nos problèmes, permettant d'offrir une meilleure conservation de la masse et une meilleure précision de la capture de l'interface. Pour cela, nous devons prendre en compte le problème de la réinitialisation de la variable de transport. Nous proposons une technique de mise-à-jour en incluant l'adaptation de maillage afin d'équidistribuer l'erreur d'interpolation. Cette nouvelle méthode s'appuie sur les techniques proposées par Remacle *et al.* (2007) pour localiser l'interface et construire la fonction distance signée associée.

1.6.3 L'adaptation en temps

L'adaptation de la discrétisation en temps est une composante d'une simulation transitoire qu'il ne faut pas négliger. Son objectif est de contrôler l'erreur de troncature associée au schéma (choisi) de discrétisation par différences finies, pour un pas de temps qui satisfait

$$\mathbf{E}_h < \epsilon_t \|\mathbf{X}_h\|,$$

où ϵ_t est un paramètre utilisateur.

Pourquoi avons nous besoin d'une adaptation de la discrétisation en temps ? Premièrement, la discrétisation en temps doit de toute manière respecter certaines contraintes, et ce, vis-à-vis de la discrétisation spatiale. Bien que nous utilisions des schéma implicites inconditionnellement stables, l'utilisation d'un pas de temps quelconque, ou grossier, conduit à une augmentation significative du nombre d'itérations de la méthode de Newton lors de la résolution des équations, une augmentation de la diffusion permettant de trouver une solution et le plus souvent à une divergence des algorithmes. La condition CFL, dont les schémas d'intégration im-

plicités permettent de nous affranchir, sont tout de même de bons indicateurs de la taille du pas de temps à utiliser :

$$\|\mathbf{u}\|_{\infty} \Delta_t < Ch, \quad C \in \mathbb{R}$$

Deuxièmement, notre objectif étant de proposer une méthodologie capable de traiter convenablement les changements de topologie, il est nécessaire de contrôler la taille du pas de temps pendant les très courtes périodes de temps où ces changements ont lieu.

La méthode des trapèzes est une méthode inconditionnellement stable, et plus précisément A-stable, et non dissipative. Son utilisation dans la discrétisation des équations de Navier-Stokes a été étudiée par Smith et Silvester (1997) et Dettmer et Perić (2003). La conclusion principale de ces travaux est que si on utilise un pas de temps constant qui n'est pas assez petit alors le manque de dissipation devient problématique. De plus, avec ce schéma, la solution présente des oscillations (Gresho et Sani (1998)) et le pas de temps obtenu par une méthodologie adaptative est généralement de l'ordre de $\Delta_{\infty} = O(\epsilon_t)$. Kay *et al.* (2010) proposent une méthodologie d'adaptation en temps, connu sous le nom TRAB2 (Gresho *et al.* (2008)), appliquée aux équations de Navier-Stokes dans le cas incompressible. Cette méthodologie contient trois ingrédients :

- le calcul de l'erreur de troncature \mathbf{E}_h^n à l'aide d'un schéma explicite d'Adams-Basforth d'ordre 2 ;
- le calcul du pas de temps Δ_n ;
- la stabilisation de la solution pour supprimer les oscillations de la solution et le caractère asymptotique du pas de temps.

L'erreur de troncature \mathbf{E}_n^{tr} de la méthode des trapèzes est approximée par

$$\mathbf{E}_n^{\text{tr}} = \frac{(\mathbf{X}_n - \overline{\mathbf{X}}_n)}{3 \left(1 + \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_n}\right)},$$

où $\overline{\mathbf{X}}_n^{\text{tr}}$ est la solution obtenue en appliquant un schéma explicite d'Adams-Basforth d'ordre 2 :

$$\overline{\mathbf{X}}_n^{\text{tr}} = \mathbf{X}_{n-1} + \frac{\Delta_n}{2} \left(\left(2 + \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}\right) \mathbf{Y}_{n-1} - \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}} \mathbf{Y}_{n-2} \right).$$

Si on considère que les dérivées en temps de troisième ordre sont suffisamment lisses, le ratio des erreurs de troncature successives est proportionnel au cube du ratio des pas de temps successifs (Kay *et al.* (2010)). Le calcul du prochain pas de temps est alors donné par

$$\Delta_n = \Delta_{n-1} \left(\frac{\epsilon_t}{\|\mathbf{E}_n^{\text{tr}}\|} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

La solution est stabilisée périodiquement en introduisant un décalage :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} t_n & = & t_{n-1} + \frac{\Delta_n}{2}; \\ t_{n-1} & = & t_{n-2} + \frac{\Delta_{n-1}}{2}; \\ \mathbf{X}_n & = & \frac{1}{2} (\mathbf{X}_n + \mathbf{X}_{n-1}); \\ \mathbf{X}_{n-1} & = & \frac{1}{2} (\mathbf{X}_{n-1} + \mathbf{X}_{n-2}). \end{array} \right.$$

Le choix de la période de stabilisation est une heuristique.

Malidi *et al.* (2000) proposent un travail similaire pour le schéma de Gear. Pour la discrétisation en temps, l'approximation de la dérivée en temps par le schéma de

Gear à pas variable s'écrit sous la forme suivante :

$$\dot{\mathbf{X}}_n \approx \frac{\left(2 + \frac{\Delta_{n-2}}{\Delta_{n-1}}\right) \mathbf{X}_n - \left(2 + \frac{\Delta_{n-2}}{\Delta_{n-1}} + \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_{n-2}}\right) \mathbf{X}_{n-1} + \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_{n-2}} \mathbf{X}_{n-2}}{\Delta_{n-1} + \Delta_{n-2}}. \quad (1.81)$$

L'erreur de troncature du schéma de Gear est estimée à l'aide du schéma explicite du point milieu à pas variable :

$$\bar{\mathbf{X}}_n^{\text{bdf2}} = \mathbf{X}_{n-1} + \left(1 + \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_{n-2}}\right) \Delta_n \mathbf{Y}_{n-1} - \left(\frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_{n-2}}\right)^2 (\mathbf{X}_{n-1} - \mathbf{X}_{n-2}). \quad (1.82)$$

L'erreur de troncature est obtenue avec la relation

$$\mathbf{E}_n^{\text{bdf2}} = \frac{\left(1 + \frac{\Delta_{n-2}}{\Delta_{n-1}}\right) \left(\mathbf{X}_n - \bar{\mathbf{X}}_n^{\text{bdf2}}\right)}{2 + \frac{\Delta_{n-2}}{\Delta_{n-1}} + 2 \frac{\Delta_{n-1}}{\Delta_{n-2}}}, \quad (1.83)$$

et le ratio des erreurs de troncature successives est ici aussi proportionnel au cube des ratio des pas de temps successifs :

$$\frac{\|\mathbf{E}_n\|}{\|\mathbf{E}_{n-1}\|} \approx \left(\frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}\right)^3 \frac{\|\ddot{\mathbf{Y}}_n\|}{\|\ddot{\mathbf{Y}}_{n-1}\|} \approx C \left(\frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}\right)^3, \quad C \in \mathbb{R}. \quad (1.84)$$

La norme $\|\cdot\|$ utilisée dans cette section se réfère à la norme au sens L_2 mais n'est pas le seul choix possible. Malidi *et al.* (2000) utilisent

$$\|\mathbf{E}_n\|^2 = \frac{1}{N_u + N_v} \left(\sum_{j=1}^{N_u} \left(\frac{E_{n,j}^u}{|u_{n,j}| + u_0} \right)^2 + \sum_{j=1}^{N_v} \left(\frac{E_{n,j}^v}{|v_{n,j}| + v_0} \right)^2 \right),$$

où u et v sont les composantes en x et en y du champ de vitesse \mathbf{X} , N_u et N_v sont les nombres de degrés de liberté de ces composantes.

La méthodologie que nous proposons pour traiter les problèmes transitoires inclut

la méthodologie d'adaptativité en temps proposée par Malidi *et al.* (2000), qui n'a pas été testée dans un cadre numérique incluant une adaptativité spatiale. Nous venons ainsi compléter ce travail de validation du contrôle de l'erreur de troncature pour le schéma de Gear.

CHAPITRE 2

LE CALCUL NUMÉRIQUE DE LA FORCE CAPILLAIRE

Résumé

Notre premier objectif est de proposer une stratégie pour modéliser numériquement la force capillaire. L'information de départ du calcul numérique de la force capillaire volumique est la variable eulérienne. Nous travaillons avec la méthode de la pseudo-concentration qui utilise une régularisation de la fonction de Heaviside comme variable de marquage. Il est donc nécessaire de bien identifier cette régularisation. Une classification des régularisations disponibles est d'abord proposée tout en illustrant leurs différentes propriétés. Pour calculer la normale \mathbf{n}_Γ et la courbure κ_Γ de la surface libre Γ_h , nous avons vu au premier chapitre que nous devons détenir un opérateur de dérivation. Notre objectif est de sélectionner une méthode de dérivation qui soit stable, précise et possédant de bonnes propriétés de convergence. Nous proposons un ensemble de tests numériques pour faire une analyse de la qualité des opérateurs de dérivation sélectionnés vis-à-vis de la classification des régularisations. Enfin, nous choisissons un problème de validation à travers une situation d'équilibre qui présente des courants parasites tel que décrit au premier chapitre. Le problème de Laplace est utilisé pour mesurer l'intensité des courants parasites et effectuer une comparaison des résultats obtenus.

Les problèmes abordés dans ce chapitre

Les problèmes de validation pour des écoulements bi-fluides avec tension superficielle (dans un contexte eulérien) se classent en deux catégories. La première catégorie contient des écoulements avec déformation importante de l'interface (tels que des bris ou des fusions d'interfaces). L'autre catégorie contient des problèmes sur des situations d'équilibre ou sur des situations qui convergent vers un équilibre, tel que le problème de Laplace. Si la méthodologie que nous proposons comporte des lacunes vis-à-vis de la précision numérique du calcul de la force capillaire volumique, non seulement les modèles à la Brackbill ne sont plus correctement appliqués, mais les résultats obtenus peuvent générer des écoulements non physiques. Ce chapitre se concentre donc sur la deuxième catégorie de problèmes qui est plus appropriée pour valider notre méthodologie.

2.1 Les régularisations

Le support Ω_ϵ d'une régularisation définie par morceaux est une bande de largeur 2ϵ centrée sur l'interface (cf. figure 1.12) et définie par

$$\Omega_\epsilon = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid |\phi(\mathbf{x})| < \epsilon\}. \quad (2.1)$$

On se donne un repère orthonormé (\mathbf{i}, \mathbf{j}) et on suppose que l'interface Γ peut être paramétrisée par $\Gamma = (x(s), y(s))$ pour $s \in [s_1, s_2]$, $x, y \in C^2([s_1, s_2])$. On suppose également que $q(s) = \sqrt{x'(s)^2 + y'(s)^2} \neq 0$.

La normale à cette courbe paramétrée est donnée par $\mathbf{n}_\Gamma = -\frac{1}{q(s)}(\mathbf{n}_x + \mathbf{n}_y)$ où

$\mathbf{n}_x = -y'(s)\mathbf{i}$ et $\mathbf{n}_y = x'(s)\mathbf{j}$ et la courbure est donnée par la relation

$$\kappa_\Gamma(s) = \frac{x'(s)y''(s) - x''(s)y'(s)}{q(s)^3}.$$

On obtient ainsi une paramétrisation de la bande Ω_ϵ dans le repère de Fresnet sous la forme d'un changement de variable :

$$\Omega_\epsilon = \{(X(s, t), Y(s, t)) = (x(s) + t\mathbf{n}_x(s), y(s) + t\mathbf{n}_y(s)) : s \in [s_1, s_2], t \in [-\epsilon, \epsilon]\},$$

et le déterminant du jacobien de cette transformation est donné par

$$\det(J(s, t)) = q(s)(1 - t\kappa(s)).$$

La relation suivante est importante puisque c'est une condition nécessaire pour que la paramétrisation de Ω_ϵ soit bien posée, i.e. $\det(J) > 0$:

$$\max_{t \in [-\epsilon, \epsilon]} |t| \max_s |\kappa(s)| < 1, \quad (2.2)$$

ce qui se traduit par une impossibilité de traiter une surface libre dont le rayon de courbure est plus grand que ϵ :

$$\max_\Gamma |\kappa| < \frac{1}{\epsilon}. \quad (2.3)$$

Pour la suite de ce chapitre, on se base sur une fonction de transition notée v , définie sur l'intervalle $[-1, 1]$ à valeurs réelles et telle que $v(-1) = 0$ et $v(1) = 1$.

La régularisation de la fonction de Heaviside s'écrit :

$$H_\epsilon(t) = \begin{cases} 1, & t > \epsilon; \\ 0, & t < -\epsilon; \\ v(\frac{t}{\epsilon}), & |t| \leq \epsilon, \end{cases} \quad (2.4)$$

et la régularisation de la fonction de Dirac associée s'écrit :

$$\delta_\epsilon(t) = \begin{cases} 0, & t > \epsilon; \\ 0, & t < -\epsilon; \\ \frac{1}{\epsilon} \frac{dv}{dt}(\frac{t}{\epsilon}), & |t| \leq \epsilon. \end{cases} \quad (2.5)$$

La fonction de Dirac est introduite dans le modèle CSF pour transformer une intégrale de surface en intégrale de volume :

$$\int_\Gamma d\Gamma = \int_\Omega \delta_\Gamma d\Omega.$$

Une première condition s'impose alors sur le choix de v :

$$\int_{-1}^1 \frac{dv}{d\xi} d\xi = \int_{-\epsilon}^\epsilon \delta_\epsilon(t) dt = 1.$$

Remarque 2.1 *La stricte monotonie de la fonction de transition v implique que la pseudo-concentration est encore une fonction distance sur Ω_ϵ .*

Les régularisations polynomiales

Nous présentons dans cette section des critères menant à la construction de familles de polynômes utilisables pour les équations (2.4) et (2.5). Une première famille de polynômes, notée $v^{0,p \geq 1}$, peut être déterminée par le degré de continuité p de v . La

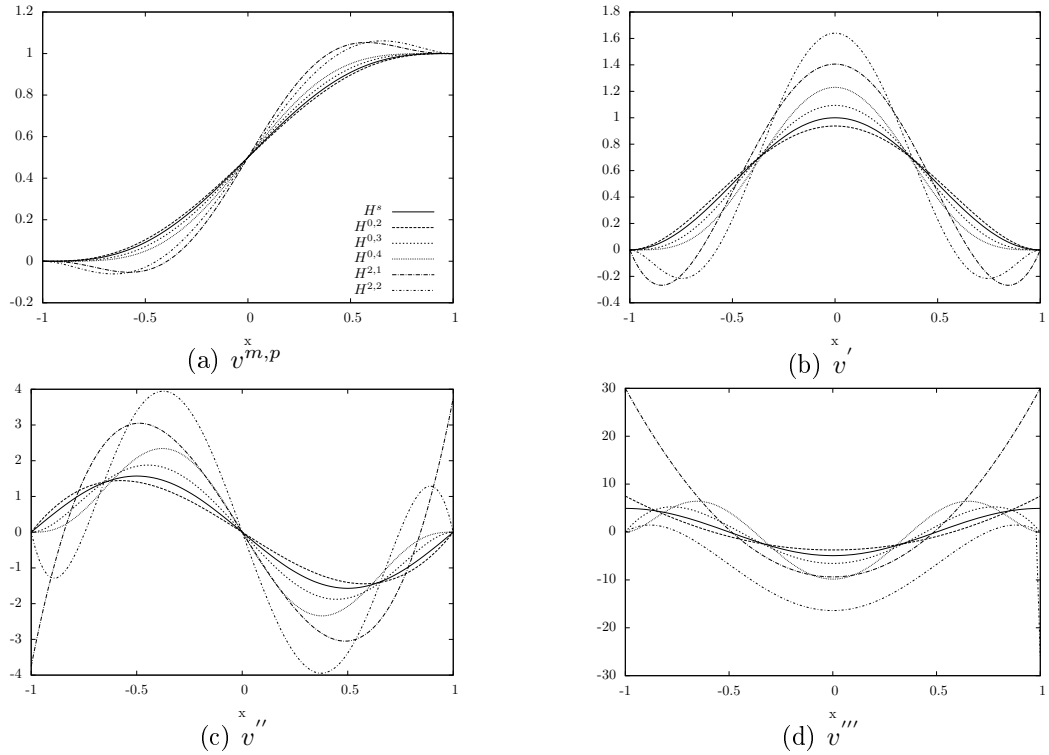


Figure 2.1: Graphes des régularisations de la fonction de Heaviside et des dérivées premières v' , secondes v'' et troisièmes v''' .

proposition suivante est illustrée au tableau 2.1.

Proposition 2.1 Soit $v^{0,p}(\xi)$ le polynôme de plus bas degré tel que :

$$\begin{cases} v^{0,p}(-1) &= 0; \\ v^{0,p}(1) &= 1; \\ (v^{0,p})^{(\beta)}(\pm 1) &= 0, \quad \beta = 1, \dots, p. \end{cases}$$

Le polynôme $v^{0,p}(\xi)$ existe, est unique, de degré $r = 2p + 1$ et s'exprime sous la forme $v^{0,p}(\xi) = (\xi + 1)^{p+1}q(\xi)$ où q est un polynôme de degré p .

Tableau 2.1: Les fonctions polynomiales de transition $v^{0,p}$ pour $p = 1, 2, \dots, 6$.

$v^{0,1}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)^2}{8} (2\xi - 4)$
$v^{0,2}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)^3}{16} (3\xi^2 - 9\xi + 8)$
$v^{0,3}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)^4}{32} (5\xi^3 - 20\xi^2 + 29\xi - 16)$
$v^{0,4}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)^5}{256} (35\xi^4 - 175\xi^3 + 345\xi^2 - 325\xi + 128)$
$v^{0,5}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)^6}{512} (63\xi^5 - 378\xi^4 + 938\xi^3 - 1218\xi^2 + 843\xi - 256)$
$v^{0,6}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)^7}{2048} (231\xi^6 - 1617\xi^5 + 4830\xi^4 - 7938\xi^3 + 7651\xi^2 - 4165\xi + 1024)$

Une propriété importante de cette famille de polynômes est la stricte monotonie,

$$\frac{dv^{0,p}}{d\xi}(\xi) > 0, \quad \forall \xi \in]-1, 1[,$$

car celle-ci implique que

$$v^{0,p}(]-1, 1[) \subset [v^{0,p}(-1), v^{0,p}(1)],$$

et permet ainsi une évaluation consistante des propriétés physiques :

$$\begin{cases} \mu(\phi(\mathbf{x})) = (\mu_1 + H(\phi(\mathbf{x}))(\mu_2 - \mu_1)), & \forall \mathbf{x} \in \Omega; \\ \mu(\phi(\mathbf{x})) \leq \mu_2, & \forall \mathbf{x} \in \Omega; \\ \mu(\phi(\mathbf{x})) \geq \mu_1, & \forall \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases}$$

Tornberg (2002) propose une généralisation de cette famille de polynômes avec des conditions supplémentaires sur les moments, illustrée au tableau 2.2.

Proposition 2.2 Soit $v^{m,p}(\xi)$ le polynôme de plus bas degré tel que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} v^{m,p}(0) & = 0; \\ v^{m,p}(1) & = 1; \\ (v^{m,p})^{(\beta)}(\pm 1) & = 0, \quad \beta = 1, \dots, p; \\ \frac{1}{\alpha+1} - \int_{-1}^1 v^{m,p}(\xi) \xi^\alpha d\xi & = 0, \quad \alpha = 0, \dots, m. \end{array} \right.$$

Le polynôme $v^{m,p}(\xi)$ existe, est unique, de degré $r = 2 \left(\lfloor \frac{m+1}{2} \rfloor \right) + 2p + 1$ et s'exprime sous la forme $v^{m,p}(\xi) = \frac{1}{2} + p(\xi)$, où $p(\xi)$ est un polynôme qui ne contient que des monômes de degré impair.

Tableau 2.2: Les fonctions polynomiales de transition $v^{m,p}$ pour $m = 2, 3, 4$ et $p = 0, 1, \dots, 3$.

$v^{2,0}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)}{8}(5\xi^2 - 5\xi + 4)$
$v^{2,1}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)^2}{32}(21\xi^3 - 42\xi^2 + 13\xi + 16)$
$v^{2,2}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)^3}{64}(45\xi^4 - 135\xi^3 + 123\xi^2 - 9\xi - 32)$
$v^{2,3}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)^4}{512}(385\xi^5 - 1540\xi^4 + 2230\xi^3 - 1220\xi^2 - 79\xi + 256)$
$v^{4,0}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)}{128}(189\xi^4 - 189\xi^3 - 161\xi^2 + 161\xi + 64)$
$v^{4,1}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)^2}{256}(495\xi^5 - 990\xi^4 + 162\xi^3 + 666\xi^2 - 269\xi - 128)$
$v^{4,2}(\xi)$	$\frac{(\xi+1)^3}{2048}(5005\xi^6 - 15015\xi^5 + 12210\xi^4 + 3410\xi^3 - 8031\xi^2 - 1653\xi + 1024)$
$v^{4,3}(\xi)$	$-\frac{(\xi+1)^4}{4096}(12285\xi^7 - 49140\xi^6 + 67795\xi^5 + 25480\xi^4 - 22565\xi^3 + 21100\xi^2 - 2203\xi - 2048)$

Les polynômes de la famille $v^{m,p}$, $m > 0$, ne sont pas strictement monotones (cf. figure 2.1(a)). Ainsi l'utilisation de ces polynômes dans la régularisation des paramètres physiques conduit à une évaluation ponctuelle non cohérente de celles-ci

dans un voisinage de l'interface :

$$\begin{cases} \mu(\phi(\mathbf{x})) > \mu_2, & \mathbf{x} \in \Omega_\epsilon; \\ \mu(\phi(\mathbf{x})) < \mu_1, & \mathbf{x} \in \Omega_\epsilon. \end{cases}$$

De façon similaire, les contraintes qui permettent de définir la régularisation de la fonction de Dirac sont les suivantes :

Proposition 2.3 *Soit $\psi^{m,p}(\xi)$ le polynôme de plus bas degré tel que :*

$$\begin{cases} \int_{-1}^1 \psi^{m,p}(\xi) d\xi &= 1; \\ (\psi^{m,p})^{(\beta)}(\pm 1) &= 0, \quad \beta = 0, \dots, p; \\ \int_{-1}^1 \psi^{m,p}(\xi) \xi^\alpha d\xi &= 0, \quad \alpha = 1, \dots, m. \end{cases}$$

Le polynôme $\psi^{m,p}(\xi)$ existe, est unique, de degré $r = 2 \left(\lfloor \frac{m}{2} \rfloor + p + 1 \right)$ et ne contient que des monômes de degré pair, et nous avons la relation $(\psi^{m,p})' = \psi^{m+1,p-1}$.

La preuve de cette proposition est disponible dans Tornberg (2002).

Des régularisations non polynomiales

On retrouve généralement dans la littérature (Fortin et Benmoussa (2006)) l'utilisation de la fonction de transition trigonométrique suivante :

$$v^s(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi > 1; \\ 0, & \xi < -1; \\ \frac{1}{2} \left(1 + \xi + \frac{1}{\pi} \sin(\pi\xi) \right), & |\xi| \leq 1. \end{cases} \quad (2.6)$$

Cette régularisation est aussi une régularisation définie par morceaux dont le degré de continuité est $p = 2$ et dont aucune condition sur les moments n'est vérifiée. En

effet, nous avons $m = 0$ puisque $\int_{-1}^1 v^s(\xi) \xi d\xi = \frac{1}{3} + \frac{1}{\pi^2}$.

D'autres régularisations peuvent être suggérées. Parmi celles qui n'appartiennent pas à la catégorie des régularisations définies par morceaux, mentionnons l'utilisation de la fonction $\tanh(\xi)$ (Devals et Bertrand (2007)), ou encore la fonction $\arctan(\xi)$:

$$v_{\alpha}^{\arctan}(\xi) = \frac{1}{\pi} \arctan(\alpha\xi) + \frac{1}{2},$$

où le paramètre α est un coefficient de raideur.

La fonction de Dirac peut aussi se régulariser par une densité de probabilité d'espérance nulle et de variance σ :

$$\delta^{\exp}(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma^2}},$$

et de laquelle on peut déduire une régularisation de la fonction de Heaviside avec un développement en série de Taylor de la fonction de répartition associée à cette densité de probabilité.

2.1.1 Les erreurs liées aux régularisations

Les régularisations polynomiales présentées à la section précédente sont construites selon les critères proposés par Tornberg (2002). Cette approche retient notre attention car elle permet une quantification de l'erreur de régularisation sur une fonction f :

$$E = J(f) - J(f_{\epsilon}),$$

où J est la quantité d'intérêt

$$J(f) = \int_{\Omega} f(\phi(\mathbf{x}))G(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad (2.7)$$

avec G une fonction donnée. La relation (2.7) est une forme générale liée à la fonction de Heaviside $H(\phi)$ qui est impliquée dans le calcul d'intégrales contenant les propriétés physiques des fluides (tel que la viscosité μ_i du fluide i)

$$J(H) = \int_{\Omega} (\mu_1 + H(\phi(\mathbf{x}))(\mu_2 - \mu_1)) G(\mathbf{x})d\mathbf{x},$$

et la fonction de Dirac $\delta(\phi)$ qui est impliquée dans le calcul de la force volumique capillaire

$$J(\delta) = \int_{\Omega} \delta(\phi(\mathbf{x}))G(\mathbf{x})d\mathbf{x}.$$

Retenons le cas particulier où $G = 1$ qui conduit aux deux quantités suivantes :

$$J(\delta) = \int_{\Omega} \delta(\phi(\mathbf{x}))d\mathbf{x}; \quad (2.8)$$

$$J(H) = \int_{\Omega} H(\phi(\mathbf{x}))d\mathbf{x}, \quad (2.9)$$

qui sont la longueur et l'aire délimitée par la surface libre.

En écrivant l'erreur commise lors de l'évaluation de la quantité (2.7) sous la forme suivante,

$$\begin{aligned} E_G(f_\epsilon) &= J(f) - \text{quad}(J(f_\epsilon)) \\ &= (J(f) - J(f_\epsilon)) + (J(f_\epsilon) - \text{quad}(J(f_\epsilon))) \\ &= E_{\epsilon,G}(f_\epsilon) + E_{q,G}(f_\epsilon), \end{aligned} \quad (2.10)$$

où « quad » désigne une intégration numérique, l'erreur est scindée en deux parties :

$$E_G = E_{\epsilon,G} + E_{q,G}.$$

$E_{\epsilon,G}$ est l'erreur de modélisation de la régularisation et $E_{q,G}$ est l'erreur d'intégration numérique.

On s'intéresse à l'erreur commise lors du calcul de la quantité

$$J(f) = \int_{\Omega_\epsilon} f(\phi(\mathbf{x}))G(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int_{s_1}^{s_2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(t)g(s,t)q(s)(1-t\kappa(s))dtds \quad (2.11)$$

où $g(s,t) = G(X(s,t), Y(s,t))$ et $f(\phi(x)) = f(t)$ grâce à $t = \phi(X(s,t), Y(s,t))$. Puisque ϵ est petit, on peut effectuer un développement de Taylor en t de $g(s,t)$ autour de $(s, 0)$ pour obtenir

$$g(s,t) = \sum_{i=0}^N \frac{t^i}{i!} g_{i,t}(s, 0) + O(t^{N+1})$$

et où $g_{i,t}$ désigne la dérivée partielle d'ordre i par rapport à t et N désigne le degré de continuité de g .

La notation $M_\alpha(f(t)) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(t)t^\alpha dt$ permet d'écrire

$$J(f) = M_0(f) \int_{s_1}^{s_2} q(s)g(s,0)ds + \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha,G} M_\alpha(f) + O(M_{N+1}(f)) \quad (2.12)$$

où

$$C_{\alpha,G} = \frac{1}{\alpha!} \int_{s_1}^{s_2} q(s)g_{\alpha,t}(s,0)ds - \frac{1}{(\alpha-1)!} \int_{s_1}^{s_2} q(s)\kappa(s)g_{(\alpha-1),t}(s,0)ds.$$

La relation (2.12) est le point de départ des travaux de Tornberg (2002).

L'erreur de modélisation

Le premier terme $E_{\epsilon,G}(f_\epsilon)$ de l'erreur (2.10) s'exprime sous la forme

$$\begin{aligned}
 E_{\epsilon,G}(f_\epsilon) &= J(f) - J(f_\epsilon) \\
 &= M_0(f - f_\epsilon) \int_{s_1}^{s_2} q(s)g(s,0)ds + \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha,G} M_\alpha(f - f_\epsilon) \\
 &+ O(M_{N+1}(f - f_\epsilon)).
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Pour exprimer l'erreur de modélisation de la régularisation de la fonction de Dirac, on pose $f = \delta_\Gamma$ dans la relation (2.13) pour obtenir

$$E_{\epsilon,G}(\delta) = J(\delta) - J(\delta_\epsilon) = - \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha,G} M_\alpha(\delta_\epsilon) + O(M_{N+1}(\delta_\epsilon)).$$

En remarquant que

$$M_\alpha(\delta_\epsilon) = \epsilon^\alpha \int_{-1}^1 v'(\xi) \xi^\alpha d\xi,$$

l'erreur s'exprime comme un polynôme en ϵ ,

$$E_{\epsilon,G}(\delta) = - \sum_{\alpha=1}^N \epsilon^\alpha C_{\alpha,G} \int_{-1}^1 v'(\xi) \xi^\alpha d\xi + O(M_{N+1}(\delta_\epsilon)),$$

et on comprend que le but recherché est de construire v tel que

$$\int_{-1}^1 v'(\xi) \xi^\alpha d\xi = 0, \quad 0 < \alpha \leq m,$$

avec m aussi grand que possible.

Le résultat suivant nous donne une quantification de l'erreur de modélisation de la régularisation de la fonction de Dirac :

Proposition 2.4 *Sous les conditions de la proposition 2.3, on note $\eta_\alpha^{m,p} = \int_{-1}^1 \psi^{m,p}(\xi) \xi^\alpha d\xi$. L'erreur de modélisation de la régularisation de la fonction de Dirac s'exprime par*

$$E_{\epsilon,G}(\delta) = -C_{\beta,G} \eta_\beta^{m,p} \epsilon^\beta + O(\epsilon^{\beta+2}), \quad \beta = 2 \left(\lfloor \frac{m}{2} \rfloor + 1 \right).$$

L'ensemble des démonstrations conduisant à ce résultat est disponible dans Tornberg (2002). Pour franchir les points essentiels de ces démonstrations, notons simplement qu'en exprimant $M_\alpha(\delta_\epsilon^{m,p})$ sous la forme

$$M_\alpha(\delta_\epsilon^{m,p}) = \epsilon^\alpha \int_{-1}^1 \psi^{m,p}(\xi) \xi^\alpha d\xi = \epsilon^\alpha \eta_\alpha^{m,p},$$

on vérifie aisément que $\eta_\alpha^{m,p} = 0$ pour α impair, $\psi^{m,p}$ étant un polynôme de degré pair. On obtient $\psi^{2i,p}(\xi) = \psi^{2i+1,p}(\xi)$ ainsi que $M_\alpha(\delta_\epsilon^{m,p}) = 0$ pour $1 \leq \alpha \leq m$ et pour $\alpha > m$, α impair. Notons aussi que $\psi^{2i,p}(\xi) = \psi^{2i+1,p}(\xi)$ puisque $\eta_\alpha^{m,p} = 0$ pour α impair, $\psi^{m,p}$ étant un polynôme de degré pair.

L'erreur de modélisation de la régularisation de la fonction de Heaviside s'écrit

$$E_{\epsilon,G}(H) = I_{\Omega_\epsilon}(H) - I_{\Omega_\epsilon}(H_\epsilon) = I_{\Omega_\epsilon}(H - H_\epsilon),$$

i.e.

$$E_{\epsilon,G}(H) = M_0(H - H_\epsilon) \int_{s_1}^{s_2} q(s) g(s, 0) ds + \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha,G} M_\alpha(H - H_\epsilon) + O(M_{N+1}(H - H_\epsilon)).$$

On note $v^{m,p}(\xi) = \int_{-1}^\xi \psi^{m+1,p-1}(\eta) d\eta$, et on remarque que

$$M_\alpha(H - H_\epsilon) = \epsilon^{\alpha+1} \left\{ \frac{1}{\alpha+1} - \int_{-1}^1 v^{m,p}(\xi) \xi^\alpha d\xi \right\} = \epsilon^{\alpha+1} \lambda_\alpha^{m,p}.$$

Le résultat suivant fournit une quantification de l'erreur de modélisation :

Proposition 2.5 *Avec les conditions de la proposition 2.2, on note $\lambda_\alpha^{m,p} = \frac{1}{\alpha+1} - \int_{-1}^1 v^{m,p}(\xi) \xi^\alpha d\xi$ et on a $\lambda_\alpha^{m,p} = 0$ pour $\alpha = 0, \dots, m$ et pour $\alpha > m$, α pair. L'erreur de modélisation de la régularisation de la fonction de Heaviside s'exprime par*

$$\left\{ \begin{array}{ll} E_{\epsilon,G}(H_\epsilon^{m,p}) &= -C_{\beta+1,G} \lambda_{\beta+1}^{m,p} \epsilon^{\beta+2} + O(\epsilon^{\beta+4}); \\ \beta &= 2 \left(\lfloor \frac{m+1}{2} \rfloor \right); \\ N &\geq \beta + 2. \end{array} \right.$$

Revenons sur le cas particulier où $G = 1$, mentionné avec l'introduction des quantités (2.7) et (2.9) :

$$\begin{aligned} J(\delta) &= \int_{\Omega} \delta(\phi(\mathbf{x})) d\mathbf{x}; \\ J(H) &= \int_{\Omega} H(\phi(\mathbf{x})) d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

D'après les propositions précédentes, pour $m = 0$, nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{ll} E_{\epsilon,1}(H^{0,p}) &= C(G,p) \lambda_1^{0,p} \epsilon^2 + O(\epsilon^4); \\ E_{\epsilon,1}(\delta^{0,p}) &= -C_G \eta_2^{0,p} \epsilon^2 + O(\epsilon^4). \end{array} \right.$$

L'utilisation des régularisations polynomiales $v^{0,p}$ et trigonométriques v^s nous donnent une erreur de modélisation en $O(\epsilon^2)$ et une erreur globale $E = E_{q,G} + O(\epsilon^2)$. L'erreur d'intégration numérique est une erreur en $O(h^q)$, q étant à déterminer, qui décroît avec le raffinement du maillage. En conclusion, utiliser des régularisations où $m = 0$ mène à une erreur qui ne converge pas avec le raffinement en espace.

L'erreur d'intégration numérique

L'erreur d'intégration numérique s'exprime comme

$$E_q(f_\epsilon) = \int_{\Omega} f_\epsilon(d) d\Omega - \text{quad}(f_\epsilon(d)).$$

On se donne $f_\epsilon \in C^k$, i.e. $f_\epsilon^{(k+1)}$ est discontinue sur les lignes de niveau $d(x) = \pm\epsilon$. L'ordre de précision de l'intégration numérique sur les triangles qui ne sont pas intersectés par les courbes $\Gamma_{-\epsilon}$ et Γ_ϵ dépend de l'ordre de la règle de quadrature utilisée.

Proposition 2.6 *Soit $\text{quad}(g) = \sum_{k=1}^q w_k g(x_k)$ une formule de quadrature exacte pour les polynômes de degré n . On introduit l'erreur de quadrature commise $E_T(g) = \int_T g dx - \text{quad}(g)$.*

Si $\min_{p_n \in P^n(T)} \max_{x \in T} |g - p_n| < C_n$ alors

$$|E_T(g)| \leq C_N(1 + C_Q)A_T,$$

avec A_T l'aire du triangle et $C_q = \frac{\sum |w_k|}{A_T}$.

Preuve :

$$E_T = \int_T (g - p_n) d\mathbf{x} + \text{quad}(p_n) - \text{quad}(g) \leq \max_{x \in T} (g - p_n) (A_T + \sum |w_k|).$$

Remarque 2.2 *Si $\forall i, w_i > 0$, alors $C_q = 1$.*

Pour pouvoir appliquer la précédente proposition, il faut estimer une borne supérieure pour la quantité $B = \min_{p_n \in P^n(T)} \max_{x \in T} |f_\epsilon(d) - p_n(x)|$. En utilisant une fonction

auxiliaire $q(d)$, alors on peut écrire

$$B \leq \max_{d \in [d_{\min}, d_{\max}]} |f_\epsilon(d) - q(d)| + \min_{p \in P^n(T)} \max_{x \in T} |q(d(x)) - p_n(x)|,$$

avec $d_{\min} = \min_{x \in T} d(x)$ et $d_{\max} = \max_{x \in T} d(x)$.

Introduisons le théorème suivant (cf. Jackson et Society (1930)) :

Proposition 2.7 *On suppose que $f \in C^k(a, b)$ et que $f^{(k+1)}$ est bornée dans l'intervalle $[a, b]$. Il existe un polynôme de degré $n \geq k$ qui satisfait $\forall t \in [a, b]$:*

$$|f(t) - q_n(t)| \leq C(n, k) \max_{s \in [a, b]} |f^{(k+1)}(s)| (b - a)^{k+1}$$

avec $C(n, k) = \frac{6^{k+1} k^k}{k! n^{k+1}} (k + 1)$.

Si on s'assure que $f_\epsilon(d)$ possède k dérivées continues, alors on peut choisir un polynôme de degré n , noté $q(d)$ et tel que

$$\max_{d \in [d_{\min}, d_{\max}]} |f_\epsilon(d) - q(d)| \leq C(n, k) \max_{t \in \mathbb{R}} |f_w^{(k+1)}(t)| h^{k+1},$$

avec $d_{\max} - d_{\min} \leq h$. De plus, la quantité $\min_{p_n \in P^n(T)} \max_{x \in T} |q(d(x)) - p_n(x)|$ est bornée, à l'aide du développement de Taylor, par

$$\min_{p_n \in P^n(T)} \max_{x \in T} |f_\epsilon(d(x)) - p_n(x)| \leq C(n, k) \max_{t \in \mathbb{R}} |f_\epsilon^{(k+1)}(t)| h^{k+1} + \tilde{C} h^{n+1}.$$

Avec ce résultat et la proposition 2.6, et en remarquant que $A_T < h^2$, on obtient

$$E_T(f_\epsilon(d)) \leq (1 + C_q) C(n, k) \max_{t \in \mathbb{R}} |f_\epsilon^{(k+1)}(t)| h^{k+3} + \tilde{C} h^{n+3}. \quad (2.14)$$

Pour les éléments complètement contenus dans I_ϵ , $f_\epsilon(d) \in C^\infty(T)$, i.e. $f_\epsilon(d)^{k+1} = 0$, ce qui nous permet d'obtenir que $E_T = O(h^{n+3})$. Si $f_\epsilon(d)$ possède k dérivées continues sur T , $k < n$, alors le premier terme de la relation (2.14) est le terme d'erreur dominant.

En sommant sur l'ensemble des triangles, on obtient pour $k < n$,

$$E_q(f_\epsilon) \leq \max |f_\epsilon^{k+1}| h^{k+2},$$

où on aura pris soin de remarquer que $N \approx \frac{1}{h}$.

Ceci nous permet d'obtenir des estimateurs « a priori » de l'erreur de quadrature :

Proposition 2.8 *L'erreur d'intégration numérique liée à la régularisation de la fonction de Dirac s'exprime comme*

$$E_q(\delta_\epsilon^{m,p}) = \frac{1}{\epsilon^{p+2}} \max_{\xi \in [-1,1]} \psi^{(p+1)} h^{p+2},$$

et l'erreur d'intégration numérique liée à la régularisation de la fonction de Heaviside comme

$$E_q(H_\epsilon^{m,p}) = \frac{1}{\epsilon^{p+1}} \max |v^{(p+1)}(\xi)| h^{p+2}.$$

Si on introduit la quantité $r = \frac{h}{\epsilon}$, nous avons

$$E_q(\delta_\epsilon) = O(r^{p+2})$$

et

$$E_q(H_\epsilon) = O(r^{p+1}h).$$

2.1.2 Illustration des erreurs de régularisation

Nous illustrons les propriétés des régularisations à travers le calcul de l'aire et de la longueur de la surface libre (cf. équations (2.8) et (2.9)) :

$$\begin{aligned} J(\delta) &= \int_{\Omega} \delta(\phi(\mathbf{x})) d\mathbf{x}; \\ J(H) &= \int_{\Omega} H(\phi(\mathbf{x})) d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

On se donne un domaine $\Omega = [-1, 1]^2$, une triangulation \mathcal{T} structurée de Ω avec une taille de maille $h = \frac{1}{8}$. L'interface est choisie comme étant un cercle centré à l'origine et de rayon $R = \frac{1}{2}$.

Le paramètre de régularisation ϵ est ici fixé à $\frac{1}{8}$. Sept successions de subdivisions locales sont effectuées pour illustrer la convergence. Le nombre d'éléments du maillage est noté $N_e \approx \frac{1}{h^2}$ et les erreurs mesurées sont l'erreur du calcul de l'aire délimité par la surface libre

$$E_{G=1}(H_{\epsilon}^{m,p}) = |\pi R^2 - J(H_{\epsilon}^{m,p})|, \quad (2.15)$$

et l'erreur du calcul de la longueur engendrée par la surface libre

$$E_{G=1}(\delta_{\epsilon}^{m,p}) = |2\pi R - J(\delta_{\epsilon}^{m,p})|. \quad (2.16)$$

La figure 2.2(a) illustre l'erreur de modélisation lorsque $m = 0$. Cette erreur correspond effectivement à $O(\epsilon^2)$. Il est surprenant de constater que l'utilisation de la famille des régularisations trigonométriques est répandue alors que nous voyons clairement dans cet exemple (cf. figures 2.2(b), 2.2(c) et 2.2(d)) qu'elle est la moins

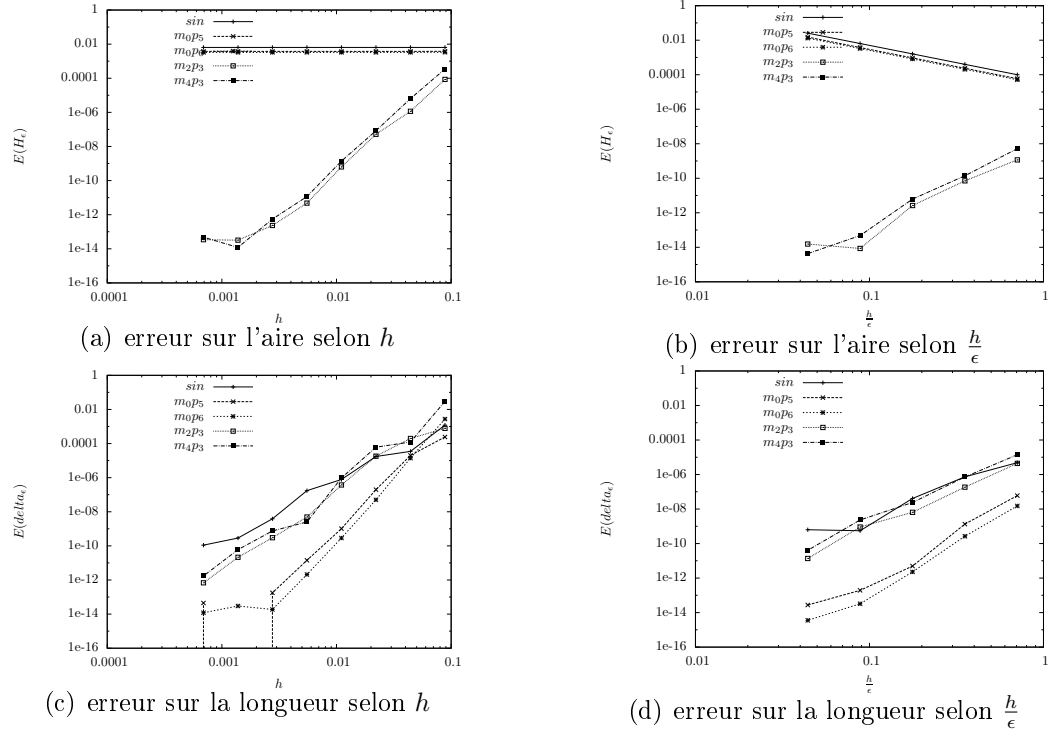


Figure 2.2: Convergence de l'erreur du le calcul de l'aire (2.15) et sur le calcul de la longueur (2.16)

performante sur la précision des approximations. Nous proposons une autre illustration pour obtenir une représentation de l'erreur en fonction de $r = \frac{h}{\epsilon}$. Une taille de maille fixe est choisie et nous faisons varier $\epsilon = 2^j$ pour $1 \leq j \leq 4$. Nous avons cette fois limité le degré d'interpolation à $k = 3$. Conformément à la théorie avec $v = v^s$, l'erreur se comporte comme $O(\epsilon^2)$ (cf. figure 2.2(c)).

2.2 Opérateur de quasi-interpolation

L'opérateur d'interpolation de Lagrange (1.39) est défini par :

$$\begin{aligned} I_h^k : C^0(\Omega) &\longrightarrow V_h^k \\ f &\longmapsto I_h^k(f) := \sum_{\mathbf{x}_i \in \Sigma_h^k} f(\mathbf{x}_i) \mathcal{N}_i^k. \end{aligned} \quad (2.17)$$

La différence entre un opérateur d'interpolation de Lagrange et un opérateur de quasi-interpolation réside dans le fait que la valeur nodale $f(\mathbf{x}_i)$ est remplacée par une valeur moyenne a_i de f autour du point \mathbf{x}_i , ou encore une régularisation locale de f :

$$\begin{aligned} Q_h^k : C(\Omega) &\longrightarrow V_h^k \\ f &\longmapsto Q_h^k f := \sum_{\mathbf{x}_i \in \Sigma_h^k} a_i(\mathbf{x}_i) \mathcal{N}_i^k, \end{aligned} \quad (2.18)$$

avec des coefficients $a_i \in \mathbb{R}$ à spécifier. Naturellement si $a_i(\mathbf{x}_i) := f(\mathbf{x}_i)$, alors nous retrouvons l'opérateur d'interpolation de Lagrange $Q_h^k = I_h^k$.

Ces opérateurs présentent les mêmes propriétés de convergence que les opérateurs d'interpolation (Girault et Raviart (1986), page 109), et possèdent de plus l'avantage de proposer une discrétisation plus robuste des fonctions discontinues ou des fonctions qui contiennent des dérivées de forte magnitude, communément appelées fonctions « non lisses ». La pseudo-concentration H_ϵ s'inscrit dans cette catégorie de fonctions lorsque ϵ est suffisamment petit. Pour appliquer un opérateur de quasi-interpolation Q_h^k , il faut définir la valeur de $(Q_h^k f)(\mathbf{x})$ sur l'ensemble des noeuds $\mathbf{x}_i \in \Sigma_h^k$ en s'appuyant sur une régularisation locale que nous choisissons ici comme étant un opérateur de projection.

On se donne un sous-domaine de Ω , noté σ_i pour son association au point \mathbf{x}_i , et on définit un opérateur de projection sur l'espace $\mathcal{P}^{r \geq k}(\sigma_i)$,

$$\Pi_{\sigma_i}^r : L^2(\sigma_i) \rightarrow \mathcal{P}^r(\sigma_i) \subset L^2(\sigma_i),$$

permettant de définir le coefficient

$$a_i := (\Pi_{\sigma_i}^r f)(\mathbf{x}_i).$$

L'opérateur Q_h^k devient

$$Q_h^{k,r} f = \sum_{\mathbf{x}_i \in \Sigma_h^k} (\Pi_{\sigma_i}^r f)(\mathbf{x}_i) \mathcal{N}_i^k.$$

L'ingrédient qui établit la différence entre les opérateurs existants dans la littérature est le choix du sous-domaine σ_i , et l'espace utilisé pour l'opérateur de projection. L'approche proposée par Zhang et Naga (2005) consiste à effectuer des projections locales uniquement aux sommets \mathbf{z}_j du maillage pour obtenir l'opérateur suivant :

$$\begin{aligned} Q_h^{k,r} f &= \sum_{\mathbf{x}_i \in \Sigma_h^k} \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_h^1} (\Pi_{\sigma_j}^r f)(\mathbf{x}_i) \mathcal{N}_j^1(\mathbf{x}_i) \right) \mathcal{N}_i^k \\ &= I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_h^1} (\Pi_{\sigma_j}^r f) \mathcal{N}_j^1 \right). \end{aligned} \tag{2.19}$$

Cette approche permet de réduire le nombre de projections locales effectuées au nombre de sommets du maillage. À chaque sommet \mathbf{z}_j de \mathcal{T}_h , nous obtenons une approximation polynomiale $p_j \in \mathcal{P}^r(\sigma_j)$. Sur un élément $K \in \mathcal{T}_h$, la restriction de

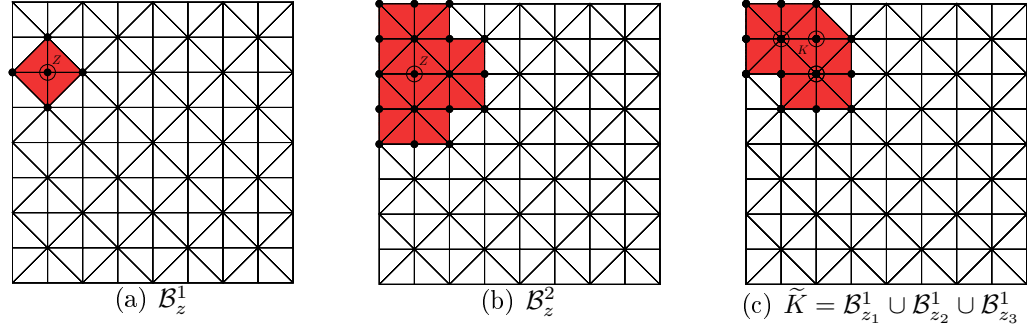


Figure 2.3: Illustration des ensembles \mathcal{B}_z^1 , \mathcal{B}_z^2 et \tilde{K}

l'opérateur $Q_h^{k,r}$ est donné par :

$$(Q_h^{k,r} f)|_K(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^3 p_j(\mathbf{x}) \mathcal{N}_j^1(\mathbf{x}),$$

où les \mathcal{N}_j^1 satisfont la partition de l'unité $\sum_{j=1}^3 \mathcal{N}_j^1 = 1$, et forment les coordonnées barycentriques du point \mathbf{x} dans le triangle K :

$$\mathbf{x} = \mathcal{N}_1^1 \mathbf{z}_1 + \mathcal{N}_2^1 \mathbf{z}_2 + \mathcal{N}_3^1 \mathbf{z}_3.$$

Remarque 2.3 $Q_h^{k,r}(f) \in V_h^{r+1}$ puisque la restriction de $Q_h^{k,r}(f)$ à chaque élément est polynomiale de degré $r+1$, ainsi nous obtenons $Q_h^{k,r} : C(\Omega) \longrightarrow V_h^{r+1}$.

Notation

La notion de cellules d'éléments est largement utilisée dans cette thèse et mérite une notation précise. Nous définissons quelques sous-ensembles spécifiques de la triangulation \mathcal{T}_h .

Définition 2.1 Pour un sommet $\mathbf{z} \in \mathcal{T}_h$, on note \mathcal{B}_z l'ensemble des $n_{\mathcal{B}}$ éléments

ayant \mathbf{z} pour sommet :

$$\mathcal{B}_z = \{K \in \mathcal{T}_h, \mathbf{z} \in K\}. \quad (2.20)$$

\mathcal{B}_z est aussi désigné sous le terme de « patch » des éléments associés à \mathbf{z} (cf. figure 2.3(a)), ou encore cellule de premier niveau (\mathcal{B}_z^1). La cellule de niveau $\ell > 1$, notée \mathcal{B}_z^ℓ , est définie récursivement comme étant l'ensemble des éléments ayant un sommet appartenant à $\mathcal{B}_z^{\ell-1}$. La figure 2.3(b) illustre une cellule de niveau 2.

On peut étendre la précédente définition à un triangle avec la définition suivante :

Définition 2.2 Pour un élément K composé des sommets $(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_3)$, on définit l'ensemble \tilde{K} comme la réunion des cellules $\mathcal{B}_{z_i}^1$ associées aux sommets de K (cf. figure 2.3(c))

$$\tilde{K} = \cup_{i=1}^3 \mathcal{B}_{z_i}^1. \quad (2.21)$$

2.2.1 L'approximation locale au sens des moindres carrés

On se donne un niveau ℓ et on pose $\sigma_i = \mathcal{B}_{z_i}^\ell$. Nous formulons ici l'opérateur $\Pi_{\sigma_i}^r f$ comme étant la solution polynomiale p_i de degré r d'un système discret aux moindres carrés :

$$\begin{aligned} \Pi_{\sigma_i}^r : L^2(\sigma_i) &\rightarrow \mathcal{P}^r(\sigma_i), \\ f &\longmapsto (\Pi_{\sigma_i}^r f)(x) := p_i(x). \end{aligned} \quad (2.22)$$

À partir d'un ensemble de valeurs discrètes obtenues sur un ensemble de points appartenant à σ_i , le problème est de reconstruire, au sens des moindres carrés, une

surface polynomiale de degré r basée sur les valeurs associées à ces points. On note $(\psi_i)_{1 \leq i \leq n_r}$ une base polynomiale de $\mathcal{P}^r(\sigma_i)$, l'ensemble des polynômes de degré au plus r sur σ_i . Pour que le problème soit bien posé, il faut déterminer au moins n_r points d'évaluations que nous notons $\ell_i \in \sigma_i$ et qui forment l'ensemble \mathcal{E}_{σ_i} . La sélection de ces points s'effectue à l'aide de la définition suivante.

Définition 2.3 *Pour chaque élément $K \in \sigma_i$, on définit \mathcal{E}_K comme un ensemble de m_k points distincts appartenant à K :*

$$\mathcal{E}_K = \{\ell_j \in K \mid 1 \leq j \leq m_k\} \quad (2.23)$$

de telle sorte que

$$m_k |\sigma_i| \geq n_r,$$

où $|\sigma_i|$ est le nombre des éléments K tels que $K \subset \sigma_i$. À l'aide de cette définition, nous notons

$$\mathcal{E}_{\sigma_i} = \cup_{K \in \sigma_i} \mathcal{E}_K. \quad (2.24)$$

Remarque 2.4 *Si \mathcal{E}_K ne possède que des points intérieurs à K , alors les éléments de \mathcal{E}_{σ_i} sont tous distincts.*

On introduit \mathcal{F}_{z_i} comme étant la translation du sommet z_i à l'origine :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_i : \sigma_i &\longrightarrow \widehat{\sigma}_i \\ \mathbf{x} &\longmapsto \mathbf{x} - \mathbf{z}_i. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Nous sommes maintenant en mesure de formuler le problème de minimisation sui-

vant : trouver $p_i \in \mathcal{P}^r(\sigma_i)$ tel que

$$J(p_i) = \min_{q \in \mathcal{P}_{\sigma_i}^r} J(q) \quad (2.26)$$

où

$$J(q) = \frac{1}{2} \sum_{K \in \sigma_i} \sum_{\ell_k \in \mathcal{E}_K} \lambda_k \left(\sum_{j=1}^{n_r} q_j \psi_j(\mathcal{F}_i(\ell_k)) - f(\ell_k) \right)^2 \quad (2.27)$$

et où $\lambda_k(\ell_k)$ sont des poids strictement positifs. Dans cette thèse nous utilisons la base polynomiale $(\psi_i)_{1 \leq i \leq n_r}$ constituée des polynômes $x^q y^p$, $p + q = r$. Cette base n'est pas la plus judicieuse mais le choix d'une meilleure base n'est pas l'objet de cette thèse. Notons qu'en dimension 1, l'utilisation d'une base de Legendre est préférable et la formulation du problème de minimisation peut être considérablement simplifiée en utilisant des points ℓ_i et une pondération λ_i tels que la fonctionnelle J coïncide avec un produit scalaire discret. Le lecteur se référera à la théorie de l'approximation polynomiale disponible dans de nombreux ouvrages (cf. Quarteroni *et al.* (2006)).

Pour résoudre ce problème, il y a n_r inconnues q_j à déterminer grâce au système d'équations formulé à partir de la condition nécessaire d'optimalité du premier ordre

$$\frac{\partial J(p_r)}{\partial q_s} = 0, \quad 1 \leq s \leq n_r, \quad (2.28)$$

et où chacune des équations $1 \leq s \leq n_r$ s'exprime sous la forme

$$\sum_{K \in \sigma_i} \sum_{\ell_k \in \mathcal{E}_K} \lambda_k \sum_{j=1}^{n_r} q_j \psi_j(\mathcal{F}_i(\ell_k)) \psi_s(\mathcal{F}_i(\ell_k)) = \sum_{K \in \sigma_i} \sum_{\ell_k \in \mathcal{E}_K} \lambda_k \psi_s(\mathcal{F}_i(\ell_k)) f(\ell_k). \quad (2.29)$$

Sous forme matricielle le système d'équations (2.29) s'exprime sous la forme

$$\mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda} \mathbf{A} \mathbf{r} = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda} \mathbf{b}, \quad (2.30)$$

où $A_{kj} = \psi_j(\mathcal{F}_i(\ell_k))$, $b_k = f(\ell_k)$ et λ_{kk} dénote les éléments diagonaux de la matrice diagonale $\boldsymbol{\lambda}$. La proposition suivante, (cf. Ortega (1987) page 162-164), est un ensemble de conditions équivalentes permettant d'affirmer l'unicité de la solution :

Proposition 2.9 *Soit $z \in \mathcal{T}_h$ un sommet du maillage et soit σ_i la cellule associée au sommet z . Les affirmations suivantes sont équivalentes :*

- la solution polynomiale p_z est unique ;
- $\text{rang}(A) = n_r$;
- $A^T A$ est inversible ;
- aucun polynôme $q \in P^{r+1}$ ne satisfait $q(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in \mathcal{E}_{\sigma_i}$.

La quatrième condition est la plus délicate et dépend du choix des paramètres du problème de minimisation locale.

Le pseudo-inverse de Moore-Penrose

Sans perte de généralité, on se place dans le cas $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{I}$. Si le rang de \mathbf{A} est égal à n_r , alors la solution \mathbf{r} du système est unique et s'exprime sous la forme

$$\mathbf{r} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}_h.$$

La matrice $\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$, connue sous le nom de pseudo-inverse de Moore-Penrose, possède un certain nombre de propriétés dont la plus éloquente : \mathbf{A}^\dagger réalise le minimum de

$$\|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{I}\|_F,$$

où $\|\cdot\|_F$ est la norme de Frobenius. Le pseudo-inverse de Moore-Penrose peut se calculer avec précision en utilisant une décomposition en valeur singulière (SVD)

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^T,$$

où \mathbf{D} est une matrice diagonale et où \mathbf{U} et \mathbf{V} sont des matrices unitaires. Cette méthode est aussi à la base des méthodes QR robustes telles qu'implémentées dans la librairie Lapack. Son coût algorithmique est supérieur à celui d'une décomposition de Cholesky appliquée sur la matrice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, mais cette dernière décomposition est moins robuste puisqu'elle n'est pas capable de fournir un résultat fiable si $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ est singulière. À l'aide de la décomposition SVD, le pseudo-inverse de Moore-Penrose s'exprime sous la forme

$$\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T = \left((\mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^T)^T \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^T \right)^{-1} (\mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^T)^T = \mathbf{V} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U}^T$$

en s'appuyant sur le fait que \mathbf{U} et \mathbf{V} sont unitaires. La matrice \mathbf{D} n'est pas nécessairement inversible, i.e. si \mathbf{A} n'est pas de rang maximal. En pratique, si le coefficient diagonal de \mathbf{D} est tel que $|D_{ii}| < \eta$, où η est une tolérance fournie par l'utilisateur, alors on pose $D_{ii}^{-1} = 0$. La solution \mathbf{r} du système (2.30) s'exprime alors dans la base des vecteurs colonnes de \mathbf{V} ,

$$\mathbf{r} = \mathbf{V} (\mathbf{D}^{-1} \mathbf{U}^T \mathbf{b}),$$

et un résultat classique nous assure que

$$\|\mathbf{A} \mathbf{r} - \mathbf{b}\|_2 \leq \|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad (2.31)$$

où $\|\cdot\|_2$ désigne la norme euclidienne. Notons enfin que $\mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger$ est un opérateur de projection orthogonale (pour la norme euclidienne) sur l'espace vectoriel engendré

par les vecteurs colonnes de A car

$$(\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)^2 = \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger.$$

Les deux opérateurs d'approximation locale

Les deux opérateurs suivants sont référencés dans Xu *et al.* (2004). Le premier opérateur est représentatif du cas sans pondération, i.e. $\lambda_{kk} = 1$. La solution p_i du système correspond à l'approximation du développement de Taylor de la fonction f dans un voisinage $\mathbf{h} = \mathbf{x} - \mathbf{z}_i$ du point \mathbf{z}_i . En effet, en notant $p_i = \sum_{j=0}^{n_r} a_j \psi_j$, la solution polynomiale s'écrit (dans le cas où $n_r = 6$) :

$$p_i(\mathbf{z}_i + \mathbf{h}) \approx f(\mathbf{z}_i) + \mathbf{h} \cdot \nabla f(\mathbf{z}_i) + \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \cdot \nabla^2 f(\mathbf{z}_i) \cdot \mathbf{h},$$

où :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} a_0 & \approx & f(\mathbf{z}); \\ a_1 & \approx & \partial_x f(\mathbf{z}); \\ a_2 & \approx & \partial_y f(\mathbf{z}); \\ 2a_3 & \approx & \partial_{xx} f(\mathbf{z}); \\ 2a_4 & \approx & \partial_{xy} f(\mathbf{z}); \\ 2a_5 & \approx & \partial_{yy} f(\mathbf{z}); \end{array} \right.$$

Dans le cas $\lambda_{kk} = 1$, l'opérateur d'approximation locale est dénoté

$$\overline{\Pi}_i^T f = \min_{q \in \mathcal{P}(\sigma_i^r)} J_{\lambda=1}(q). \quad (2.32)$$

Si dans la relation (2.27) on utilise une pondération $\lambda_{kk}(\ell_k)$ telle que la norme vectorielle euclidienne coïncide avec la norme (discrète) de l'espace L_2 , alors nous

obtenons un opérateur projection orthogonale sur \mathcal{P}^r , ou plus précisément une approximation puisque les produits scalaires utilisés sont discrets, c'est à dire qu'ils sont numériquement approximatés à l'aide d'une formule de quadrature.

Si on choisit les points ℓ_j comme étant ceux d'une règle de quadrature et si on choisit les poids $\lambda(\ell_j) = 2|K|w_i$, où w_i sont les poids de cette même règle de quadrature, alors la relation (2.29) devient

$$\sum_{j=1}^{n_r} q_j \left(\sum_{K \in \sigma_i} 2|K| \left(\sum_{\ell_k \in \mathcal{E}_K} \omega_k A_{jk} A_{sk} \right) \right) = \sum_{K \in \sigma_i} 2|K| \left(\sum_{\ell_k \in \mathcal{E}_K} \omega_k A_{sk} f(\ell_k) \right).$$

Il est facile de voir que dans le cas où $f_h \in W_h^r$, cette dernière relation peut s'écrire

$$\sum_{j=1}^{n_r} q_j \int_{\sigma_i} \psi_s(\mathbf{x} - \mathbf{z}_i) \psi_j(\mathbf{x} - \mathbf{z}_i) d\sigma_i = \int_{\sigma_i} f_h(\mathbf{x}) \psi_s(\mathbf{x} - \mathbf{z}_i) d\sigma_i$$

si la formule de quadrature est choisie de façon à intégrer exactement un polynôme de degré $2r$:

$$\int_{K \in \sigma_i} \psi_k \psi_j dK.$$

Nous obtenons ainsi la meilleure approximation locale de f dans $P^r(\sigma_i)$, au sens du produit scalaire de l'espace $L^2(\sigma_i)$ puisque $p_r(\mathbf{z}, \cdot) = \sum_{i=1}^{n_r} q_i \psi_i$ vérifie

$$\int_{\sigma_i} (p_r(\mathbf{z}, \cdot) - f_h) \psi_j = 0, \quad \forall \psi_j \in \mathcal{P}^r.$$

Nous obtenons une représentation différente de l'approximation de la fonction f puisque la solution polynomiale obtenue est une projection orthogonale au sens L_2 . Pour s'en convaincre, le coefficient a_0 correspondant à l'approximation de $f(\mathbf{z})$

s'exprime sous la forme

$$a_0 = \frac{\int_{\sigma_i} f d\sigma_i}{\int_{\sigma_i} d\sigma_i},$$

où apparaît une valeur moyenne de la fonction f :

$$\tilde{\Pi}_i^r f = \min_{q \in \mathcal{P}_{\sigma_i}^r} J_\lambda(q), \quad (2.33)$$

sous la contrainte

$$|K| \left(\sum_{\ell_k \in \mathcal{E}_K} \lambda_k q(\ell_k)^2 \right) = \int_K q^2 dK, \forall q \in \mathcal{P}^r(K). \quad (2.34)$$

Ainsi nous possédons deux types d'opérateurs de quasi-interpolation. À l'aide de l'approximation locale (2.32), on définit un premier opérateur

$$\overline{Q}_h^{k,r} f = I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_K^1} (\overline{\Pi}_j^r f) \mathcal{N}_j^1 \right). \quad (2.35)$$

Le second opérateur est basé sur l'approximation locale (2.33) et s'exprime sous la forme

$$\tilde{Q}_h^{k,r} f = I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_K^1} (\tilde{\Pi}_j^r f) \mathcal{N}_j^1 \right). \quad (2.36)$$

2.2.2 La sélection des paramètres de l'approximation au sens des moindres carrés

Nous présentons ici la méthodologie de construction des ensembles \mathcal{E}_{σ_i} (2.24) lorsque $\sigma_i = \mathcal{B}_i^\ell$ avec $\ell = 1$. Le cas $\ell > 1$ fera l'objet d'une remarque.

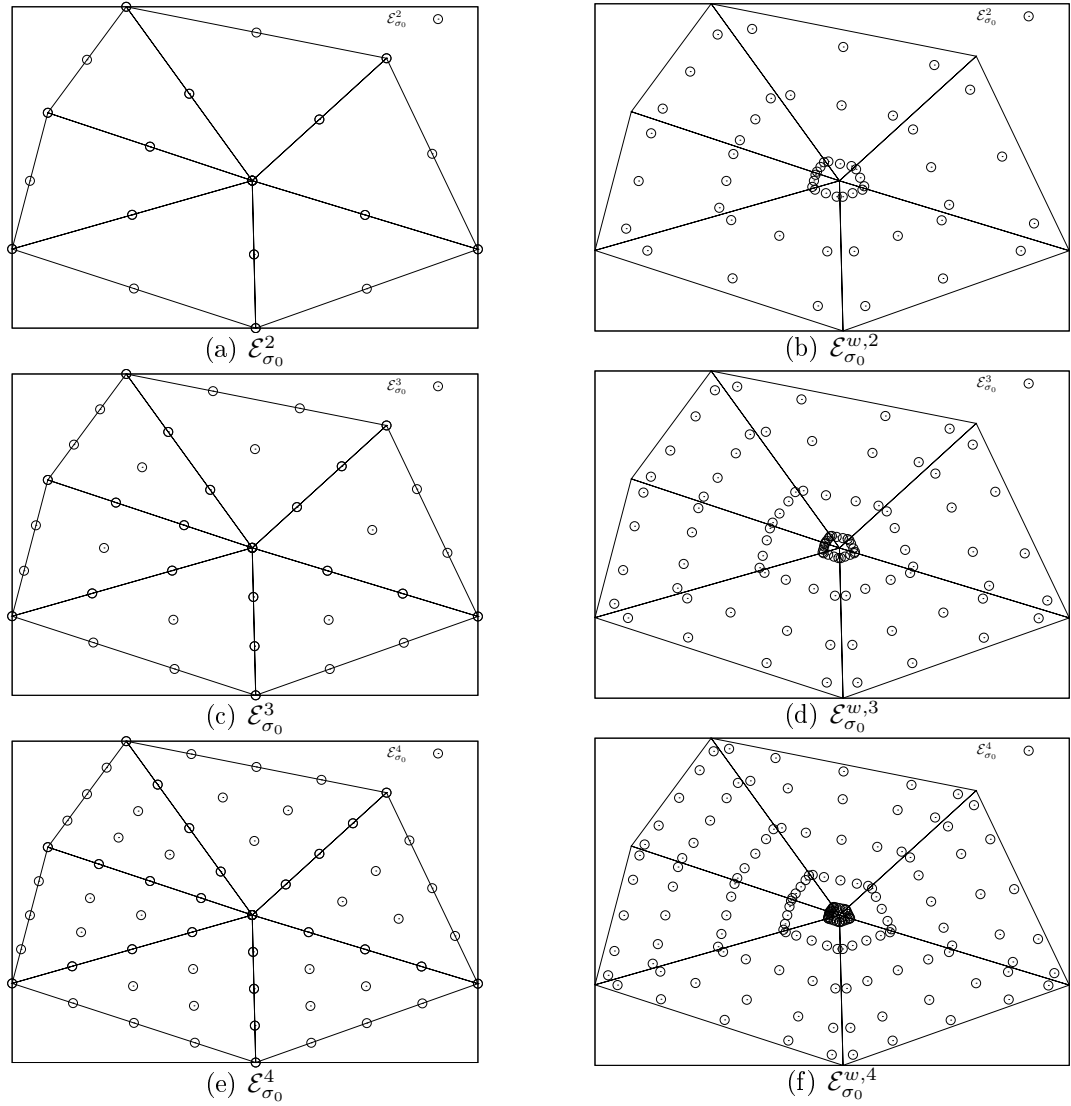


Figure 2.4: Illustration des ensembles \mathcal{E}_{σ_0} et $\mathcal{E}_{\sigma_0}^w$ associé au sommet $z_0 = 0$

Les points issus d'une formule de quadrature

L'ensemble $\mathcal{E}_K^{w,r}$ est défini comme étant l'image par la transformation \mathcal{F}_K d'un ensemble de points $\hat{\mathbf{x}} \in \hat{K}$ issus d'une formule de quadrature à m_k points

$$\mathcal{E}_K^{w,r} = \mathcal{F}_K((\hat{\mathbf{x}}_i)_{1 \leq i \leq m_k}).$$

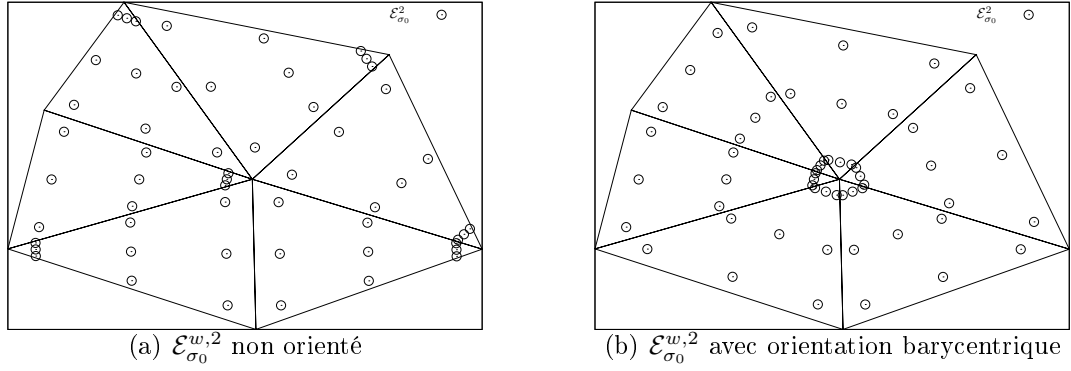


Figure 2.5: Illustration de l'orientation barycentrique de $\mathcal{E}_{\sigma_0}^w$ associée au sommet de la cellule

Cette formule de quadrature doit être choisie pour au moins intégrer exactement des polynômes de degré $2r$. Nous nous baserons sur une extension de la formule de quadrature 1D de Gauss-Legendre à $(r + 1)$ points, proposée par Rathod *et al.* (2007), et dont le nombre de points résultant est $m_k = (r + 1)^2$. Les figures 2.4(b), 2.4(d) et 2.4(f) illustrent les ensembles $\mathcal{E}_{\sigma_i}^{w,r}$ pour $r = 2, 3$ et 4.

Remarque 2.5 *Les points proposés sont tous distincts et sont construits de telle manière que la quatrième condition de la proposition 2.9 soit satisfaite.*

Remarque 2.6 *Les points ne sont pas symétriques sur l'élément \hat{K} . Le résultat obtenu à la figure 2.5(b) est le fruit d'une orientation dépendante de la coordonnée barycentrique de $\mathbf{0}$ dans l'élément $K \in \sigma_0$ (cf. figure 2.5(a)).*

Désignons par l'indice « q » l'utilisation de l'ensemble des points de quadrature $\mathcal{E}_K^{w,r}$ pour formuler le problème local au sens des moindres carrés. Avec les deux opérateurs (2.35) et (2.36) introduits précédemment, nous définissons les deux opérateurs suivants :

$$\overline{Q}_q^{k,r} f = I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_K^1} (\overline{\Pi}_{j,q}^r f) \mathcal{N}_j^1 \right), \quad (2.37)$$

et

$$\tilde{Q}_q^{k,r} f = I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_K^1} (\tilde{\Pi}_{j,q}^r f) \mathcal{N}_j^1 \right). \quad (2.38)$$

Les points issus du treillis de Lagrange

La solution \mathbf{r} du problème aux moindres carrés vérifie également

$$\mathbf{A}\mathbf{r} = \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger \mathbf{b},$$

et puisque $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ est un opérateur de projection orthogonale sur l'espace engendré par les colonnes de \mathbf{A} , il serait intéressant que les colonnes de \mathbf{A} soient la représentation matricielle dans $V_h^r(\sigma_i)$ de la base de \mathcal{P}^r . Si la colonne j de \mathbf{A} est la représentation de la fonction de base ψ_j dans $V_h^r(\sigma_i)$, alors l'image de l'application \mathbf{A} correspond à l'espace des polynômes de degré au plus r que nous avons noté $\mathcal{P}_r(\sigma_i) \subset V_h(\sigma_i)$. Ceci est réalisable en choisissant $\mathcal{E}_K = \Sigma_K^r$, c'est-à-dire les points ℓ_i appartenant au treillis d'ordre r (cf. équation (1.34)).

L'ensemble \mathcal{E}_K^r est défini comme étant l'image par la transformation \mathcal{F}_K du treillis $\Sigma_{\hat{K}}^r$:

$$\mathcal{E}_K^r = \mathcal{F}_K(\Sigma_{\hat{K}}^r).$$

L'unicité des éléments de \mathcal{E}_{σ_i} est vérifiée seulement si on pose $\mathcal{E}_{\sigma_i} = \Sigma_h^r(\sigma_i)$ (cf. équation (1.36)). Dans ce cas \mathbf{A} est de rang maximal et la solution est unique. Cependant le cas important des fonctions discontinues $f \in W_h^k(K)$ ne peut être traité avec cette approche puisque l'évaluation de f en ces points n'est pas unique. L'approximation numérique du pseudo-inverse de Moore-Penrose présenté précédemment nous permet de nous affranchir de la condition de l'unicité de ces paramètres

et le cas $f \in W_h^k(K)$ peut ainsi être traité sans difficulté en posant

$$\mathcal{E}_{\sigma_i} = \cup_{K \in \sigma_i} \mathcal{F}_K \left(\Sigma_{\hat{K}}^r \right).$$

Les figures 2.4(a), 2.4(c) et 2.4(e) illustrent les ensembles $\mathcal{E}_{\sigma_i}^r$ pour $r = 2, 3$ et 4.

Remarque 2.7 *Les points proposés ne sont pas tous distincts et la quatrième condition de la proposition 2.9 n'est plus vérifiée.*

Remarque 2.8 *L'orientation barycentrique des points, présentée à la figure 2.5(b), n'est pas nécessaire ici car la position des noeuds est indépendante de la numérotation des sommets de l'élément.*

Remarque 2.9 *La concentration des points de l'ensemble \mathcal{E}_{σ_i} autour de \mathbf{z} est différente de l'ensemble $\mathcal{E}_{\sigma_i}^w$ (cf. figures 2.4(a) et 2.4(b)).*

Nous proposons une autre formulation pour que l'opérateur de projection orthogonale $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ coïncide avec l'opérateur de projection orthogonale au sens L_2 . L'objectif est de construire une base telle que

$$\int_{\sigma_i} \bar{\psi}_i \bar{\psi}_j dx = \delta_{ij}.$$

Introduisons une base orthonormale $(\hat{\mathcal{O}}_i)_{1 \leq i \leq n_r}$ définie sur l'élément de référence \hat{K} telle que

$$\int_{\hat{K}} \hat{\mathcal{O}}_i \hat{\mathcal{O}}_j dx = \delta_{ij}.$$

Nous notons $\mathbf{B}_{\hat{\mathcal{O}}, \mathcal{N}}$ la matrice de passage de la base de Lagrange $\hat{\mathcal{N}}$ vers la base $\hat{\mathcal{O}}$,

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\hat{K}} = \mathbf{B}_{\hat{\mathcal{O}}, \mathcal{N}} \mathbf{f}_{\hat{K}},$$

de telle sorte que (cf. équation (1.60))

$$\sum_{i=1}^{n_r} f_i \hat{\mathcal{N}}_i(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^{n_r} \tilde{f}_{K,i} \hat{\mathcal{O}}_i(\hat{\mathbf{x}}).$$

Une telle base peut aisément se calculer en s'appuyant sur le procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt qui est également théoriquement utilisable pour la construction de la base $(\bar{\psi})_{1 \leq i \leq n_r}$.

La restriction à $K \in \sigma_i$ de chaque fonction de base ψ_i est d'abord exprimée dans la base de Lagrange $\hat{\mathcal{N}}$,

$$\psi_{i|K} = \sum_{j=1}^{n_r} \psi_i(\hat{X}_j) \hat{\mathcal{N}}_j,$$

puis dans la base orthonormale $\hat{\mathcal{O}}$,

$$\psi_{i|K} = \sum_{j=1}^{n_r} \psi_{i,j}^{\hat{\mathcal{O}}} \hat{\mathcal{O}}_j,$$

et on peut ainsi écrire :

$$\int_{\sigma_i} \psi_p \psi_q d\sigma_i = \sum_{K_j \in \sigma_i} \int_{K_j} \psi_{p|K_j} \psi_{q|K_j} dK;$$

$$\int_{\sigma_i} \psi_p \psi_q d\sigma_i = \sum_{K_j \in \sigma_i} 2|K_j| \sum_{r=1}^{n_r} \psi_{p,r}^{\hat{\mathcal{O}}} \psi_{q,r}^{\hat{\mathcal{O}}}.$$

La construction d'une base orthonormale au sens L_2 sur σ_i est donnée par :

$$\bar{\psi}_{p,i}^{\mathcal{O}} = \psi_{p,i}^{\mathcal{O}} - \sum_{k=1}^{p-1} \left(\sum_{K_m \in \sigma_i} 2|K_m| \sum_{r=1}^{n_r} \psi_{p,r}^{\mathcal{O}} \bar{\psi}_{q,r}^{\mathcal{O}} \right) \bar{\psi}_{r,j} d\sigma_i,$$

i.e.

$$\overline{\psi}_{p,i}^{\mathcal{O}} = \frac{\overline{\psi}_i}{\sum_{K_j \in \sigma_i} 2|K_j| \sum_{r=1}^{n_r} \psi_{p,r}^{\mathcal{O}} \psi_{q,r}^{\mathcal{O}}}.$$

L'application directe du procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt est un exemple classique d'algorithme numériquement instable, et malheureusement l'algorithme décrit précédemment n'échappe pas à la règle. Cependant l'orthonormalisation est obtenue de façon sous jacente avec la décomposition en valeur singulière. En effet, puisque $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T$, nous avons

$$\mathbf{A}\mathbf{V}^T\mathbf{D}^{-1} = \mathbf{U},$$

ce qui signifie que $\mathbf{V}^T\mathbf{D}^{-1}$ est la matrice de passage entre la base dite canonique et une base orthonormale au sens L_2 , et que \mathbf{U} contient les représentations dans $V_h(\sigma_i)$ des fonctions de base orthonormales (à une permutation près). Finalement l'approche proposée ici pondère le système (2.30) pour obtenir

$$\mathbf{A}^T\boldsymbol{\lambda}\mathbf{A}\mathbf{r} = \mathbf{A}^T\boldsymbol{\lambda}\mathbf{b}_h, \quad (2.39)$$

où la matrice de pondération $\boldsymbol{\lambda}$ n'est plus simplement diagonale, mais diagonale par blocs et où chaque bloc diagonal $\boldsymbol{\lambda}_{ii}$ s'exprime sous la forme

$$\boldsymbol{\lambda}_{ii} = \sqrt{2|K_i|}\mathbf{B}_{\hat{\mathcal{O}},\hat{\mathcal{N}}}. \quad (2.40)$$

L'indice « t » désigne l'utilisation des points de Lagrange \mathcal{E}_K^r pour formuler le problème local au sens des moindres carrés. En se basant encore une fois sur les

deux opérateurs (2.35) et (2.36), nous définissons :

$$\overline{Q}_t^{k,r} f = I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_K^1} (\overline{\Pi}_{j,t}^r f) \mathcal{N}_j^1 \right), \quad (2.41)$$

et

$$\tilde{Q}_t^{k,r} f = I_h^k \left(\sum_{\mathbf{z}_j \in \Sigma_K^1} (\tilde{\Pi}_{j,t}^r f) \mathcal{N}_j^1 \right). \quad (2.42)$$

2.2.3 Discrétisation globale de l'opérateur

Dans le cas où la fonction f considérée est une fonction discrète $f_h \in W_h^k$ (par exemple $f_h = I_h^k(f)$, ou encore $f_h = \pi_h^k(f)$), alors l'évaluation de f_h est linéaire et l'opérateur $Q_h^k(I_h^k(f))$ est une application linéaire de W_h^k dans V_h^k . Nous pouvons alors construire sa représentation matricielle globale. L'intérêt de cette construction est de réduire l'application de l'opérateur à un simple produit matrice-vecteur. Cela représente un grand intérêt lorsque ce produit doit être appliqué de nombreuses fois au cours d'une simulation numérique.

Pour un sommet \mathbf{z}_i du maillage, on note \mathbf{A}_i^\dagger le pseudo-inverse de Moore-Penrose associé à ce sommet et \mathbf{B}_i est la matrice contenant l'évaluation des fonctions $\mathcal{N}_i \psi$ sur les degrés de liberté de $V_h^k(\mathcal{B}_i^1)$, et \mathbf{C}_i est la matrice d'évaluation de la fonction discrète f_h aux points $\mathcal{E}_{\mathcal{B}_i^1}$. Notons que dans le cas de l'approximation locale $\Pi_i^r = \overline{\Pi}_{i,t}^r$ et si f_h est interpolé dans la base de Lagrange alors nous avons $\mathbf{C}_i = \mathbf{I}$.

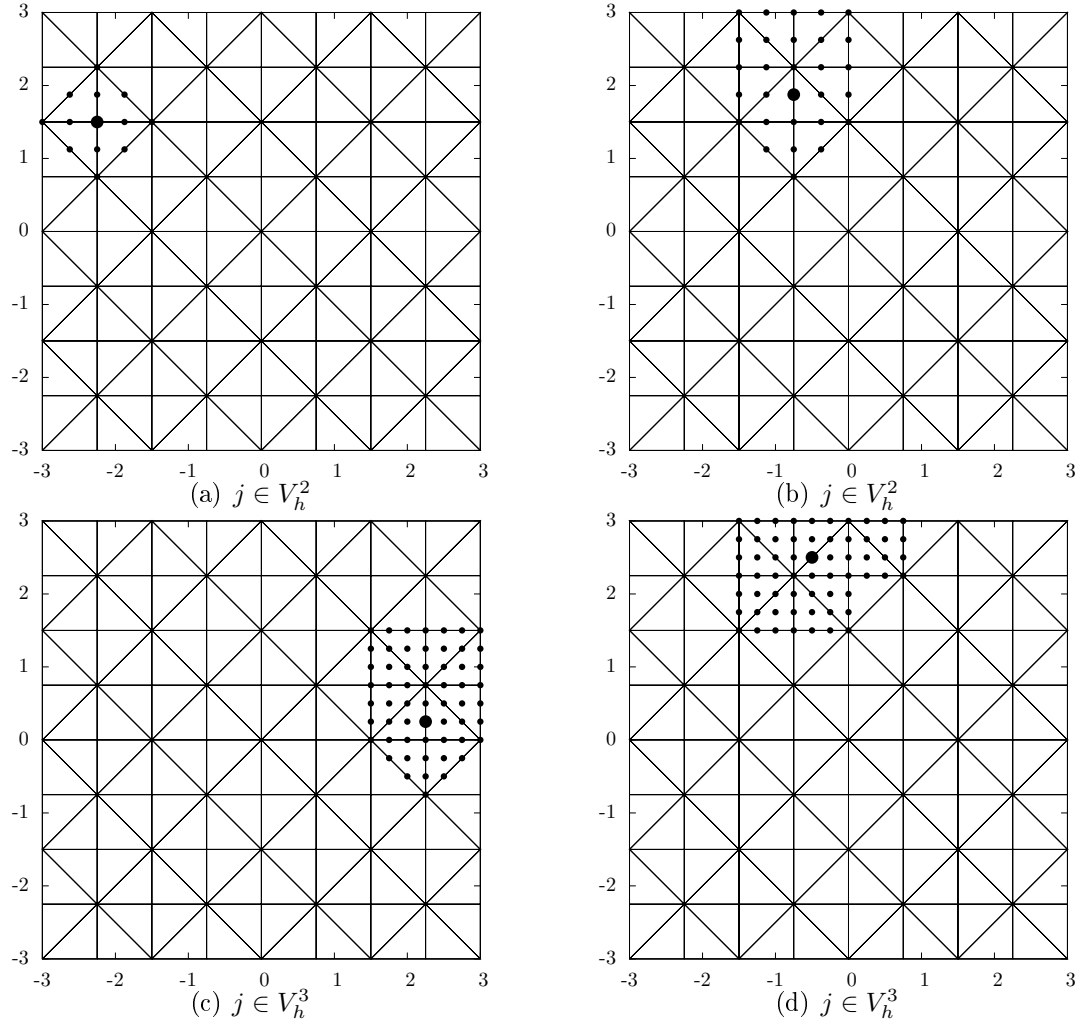


Figure 2.6: Dépendance symbolique d'un degré de liberté j pour l'opérateur de quasi-interpolation de niveau $\ell = 1$

On introduit un premier opérateur local :

$$\begin{aligned}
 \text{op}_i^\ell : W_h^k(\mathcal{B}_i^\ell) &\longrightarrow V_h^k(\mathcal{B}_i^1) \\
 f_h &\longmapsto \mathbf{B}_i \mathbf{A}_i^\dagger \mathbf{C}_i f_h.
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

Sur le maillage \mathcal{T} on obtient

$$\begin{aligned} \text{op}_h^\ell : W_h^k &\longrightarrow V_h^k \\ f_h &\longmapsto \sum_{i \in \Sigma_h^1} \text{op}_i^\ell f_h. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Nous pouvons alors construire la représentation matricielle globale de l'opérateur

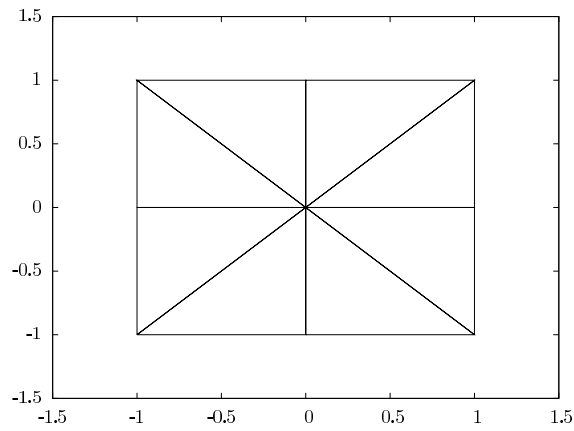


Figure 2.7: Cellule de type Union-Jack

par un algorithme d'assemblage semblable à celui utilisé dans la méthode des éléments finis. Cette matrice est plus dense qu'une matrice construite avec la méthode des éléments finis. En effet, le support de la dépendance symbolique d'un degré de liberté associé à un sommet est identique uniquement pour des cellules de niveau $\ell = 1$ (cf. figure 2.6(a)). Si le degré de liberté n'est pas associé à un sommet, alors le domaine de dépendance est beaucoup plus large (cf. figure 2.6(b) pour l'illustration d'un degré de liberté associé à une arête). La figure 2.8 illustre le graphe des représentations matricielles de quelques opérateurs.

Remarque 2.10 *La structure symbolique de la représentation matricielle de $Q_h^k(I_h^k)$ est compatible avec la structure symbolique de la méthode des éléments finis uniquement pour $k = 1$.*

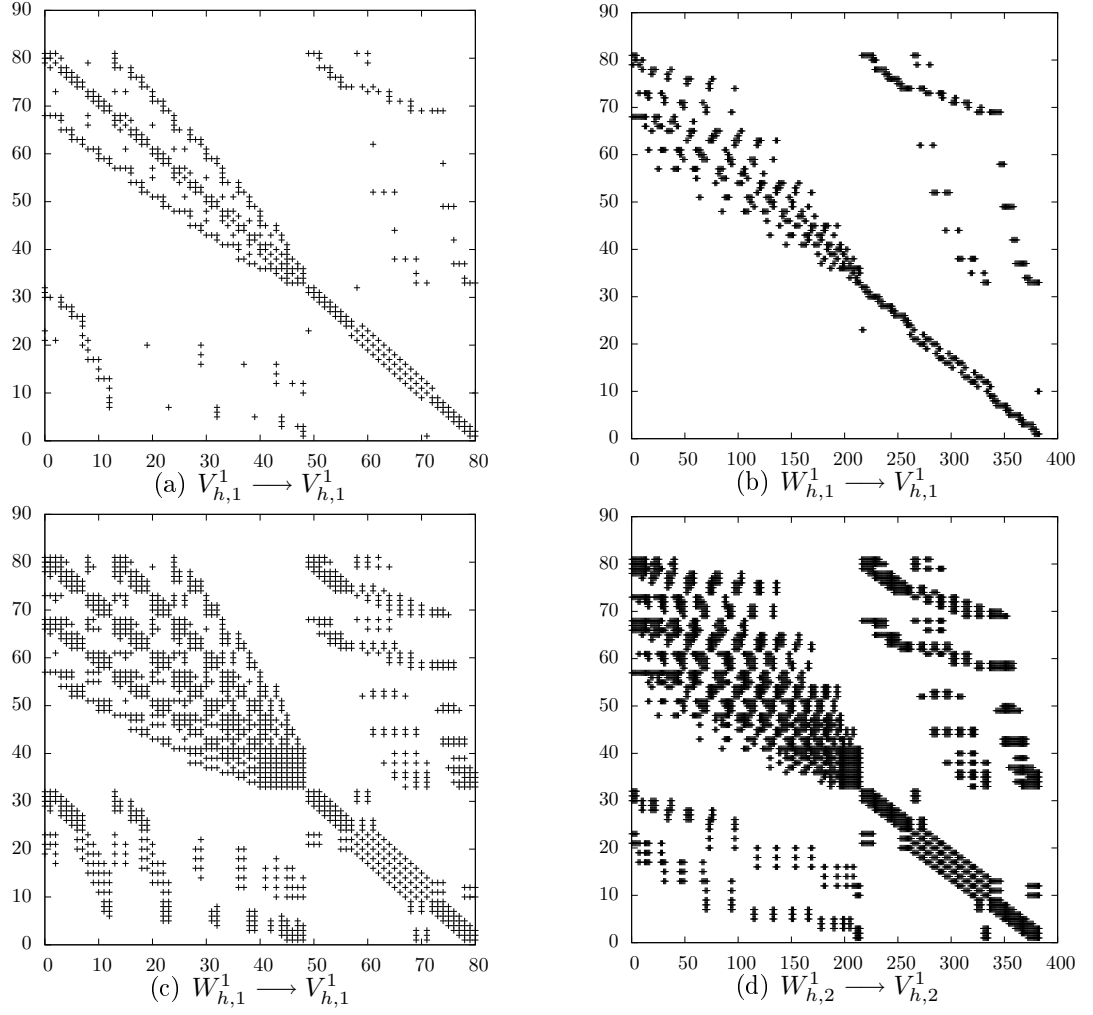


Figure 2.8: Structure symbolique de la représentation matricielle de l'opérateur de quasi-interpolation

Nous proposons de construire la représentation matricielle sur une cellule de type Union-Jack tel qu'illustré à la figure 2.7. La figure 2.9 illustre la ligne associée à l'origine de la matrice globale pour l'opérateur $Q_h^1(I_h^1)$ en utilisant différentes projections locales. L'évaluation de l'opérateur est une combinaison linéaire des évaluations de f aux degrés de liberté de V_h^1 (ou de W_h^1) :

$$Q_h^1(I_h^1(f))(\mathbf{0}) = \sum_{i \in \Sigma_h^1} p_i f(\mathbf{x}_i).$$

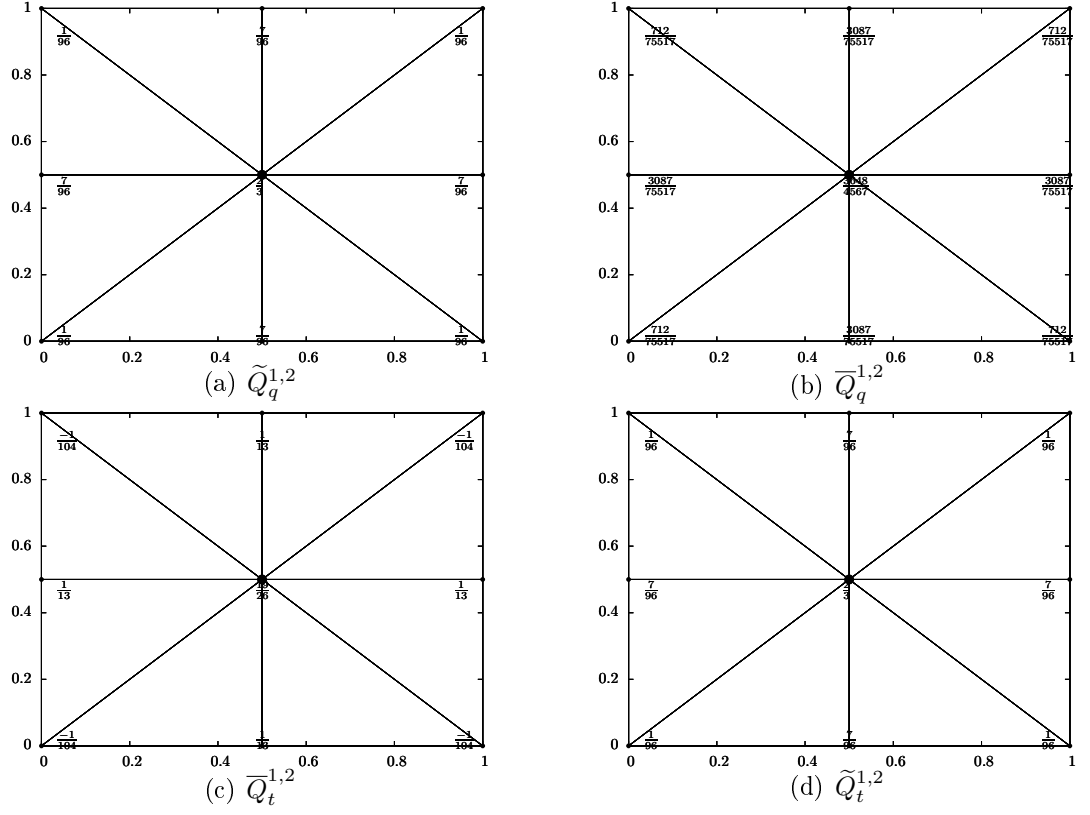


Figure 2.9: Pondération des valeurs nodales pour le calcul de $Q_h^{1,2}(I_h^1)$ au point milieu

Si les coefficients p_i sont tous positifs alors $\|Q_h^k(I_h^k)\|_\infty = 1$, et les valeurs propres sont toutes à valeurs réelles et sont comprises dans le disque unité puisque pour une valeur propre λ associée à un vecteur propre v_h nous avons $|\lambda| \|v_h\|_\infty \leq \|v_h\|_\infty$. La conséquence de cette propriété est que l'opérateur de quasi-interpolation est à valeurs bornées, et dans le cas de la figure 2.9 (à l'exception de la figure c) nous avons

$$|Q_h^1(I_h^1(f))(\mathbf{0})| \leq \max_{j \in \Sigma_h^1} |f(\mathbf{x}_j)|.$$

Remarque sur les symétries

On considère une cellule d'éléments \mathcal{B}_o telle qu'illustrée à la figure 2.7. Cette cellule possède la propriété d'être complètement symétrique vis à vis de l'origine. L'espace polynomial $P^k \setminus P^{k-1}(\mathcal{B}_o)$ est orthogonal à l'espace $P^{k+1} \setminus P^k(\mathcal{B}_o)$ pour le produit scalaire usuel de l'espace $L^2(\mathcal{B}_o)$.

Soit $f \in P^k \setminus P^{k-1}(\mathcal{B}_o)$ et $g \in P^{k+1} \setminus P^k(\mathcal{B}_o)$, alors

$$\int_{\mathcal{B}_o} fg d\mathcal{B}_o = \int_{\mathcal{B}_o} x^{r_f} y^{s_f} x^{r_g} y^{s_g} d\mathcal{B}_o$$

où

$$\begin{cases} r_f + s_f &= k + 1; \\ r_g + s_g &= k \end{cases}$$

Les deux conditions précédentes permettent d'écrire

$$(r_f + r_g) + (s_f + s_g) = r_{fg} + s_{fg} = 2k + 1,$$

ce qui signifie qu'un de ces deux entiers est impair.

2.2.4 Application à la reconstruction des dérivées

Nous proposons d'examiner deux approches pour reconstruire le gradient. Pour $f_h \in W_h^k$, l'approche proposée par Zhang et Naga (2005) consiste à appliquer l'opérateur $Q_h^{k,r}$ sur f_h (avec $r \geq k$), pour ensuite obtenir une reconstruction du gradient de la façon suivante :

$$\nabla_N^{k,r} : W_h^k \longrightarrow V_h^k$$

$$f_h \longmapsto \nabla_N f_h = I_h^k \left(\sum_{i \in \Sigma_h^1} \nabla \Pi_i^r(f_h) \mathcal{N}_i^1 \right), \quad (2.45)$$

où précisément

$$\nabla \Pi_{\sigma_i}^r f_h = \nabla p_i(\mathbf{z}_i, \mathcal{F}_i) \nabla \mathcal{F}_i. \quad (2.46)$$

Nous utilisons les 4 approximations locales $\overline{\Pi}_q$, $\overline{\Pi}_t$, $\widetilde{\Pi}_q$ et $\widetilde{\Pi}_t$ pour définir les 4 opérateurs suivant :

$$\overline{\nabla}_{N,q}^{k,r} = I_h^k \left(\sum_{i \in \Sigma_h^1} \nabla \overline{\Pi}_{i,q}^r(f_h) \mathcal{N}_i^1 \right); \quad (2.47)$$

$$\overline{\nabla}_{N,t}^{k,r} = I_h^k \left(\sum_{i \in \Sigma_h^1} \nabla \overline{\Pi}_{i,t}^r(f_h) \mathcal{N}_i^1 \right); \quad (2.48)$$

$$\widetilde{\nabla}_{N,q}^{k,r} = I_h^k \left(\sum_{i \in \Sigma_h^1} \nabla \widetilde{\Pi}_{i,q}^r(f_h) \mathcal{N}_i^1 \right); \quad (2.49)$$

$$\widetilde{\nabla}_{N,t}^{k,r} = I_h^k \left(\sum_{i \in \Sigma_h^1} \nabla \widetilde{\Pi}_{i,t}^r(f_h) \mathcal{N}_i^1 \right). \quad (2.50)$$

On effectue un test de convergence avec les paramètres suivants. On se donne une surface libre représentée par un cercle de rayon $r = 10$ et de centre $(\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2})$, et un paramètre $\epsilon = \frac{1}{4}$. La régularisation utilisée est $f_h = H_\epsilon^{0,6}$. On génère un maillage anisotrope de $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, illustré à la figure 2.10(a), tel que $\|H_\epsilon - I_h^1 H_\epsilon\|_\infty < 10^{-2}$. Nous utilisons pour cela une métrique basée sur le hessien. Nous verrons au quatrième chapitre de cette thèse la stratégie que nous adoptons pour le calcul de la métrique associée à la variable eulérienne. Nous pouvons cependant remarquer dès à présent que le hessien des régularisations de la fonction de Heaviside s'annule à

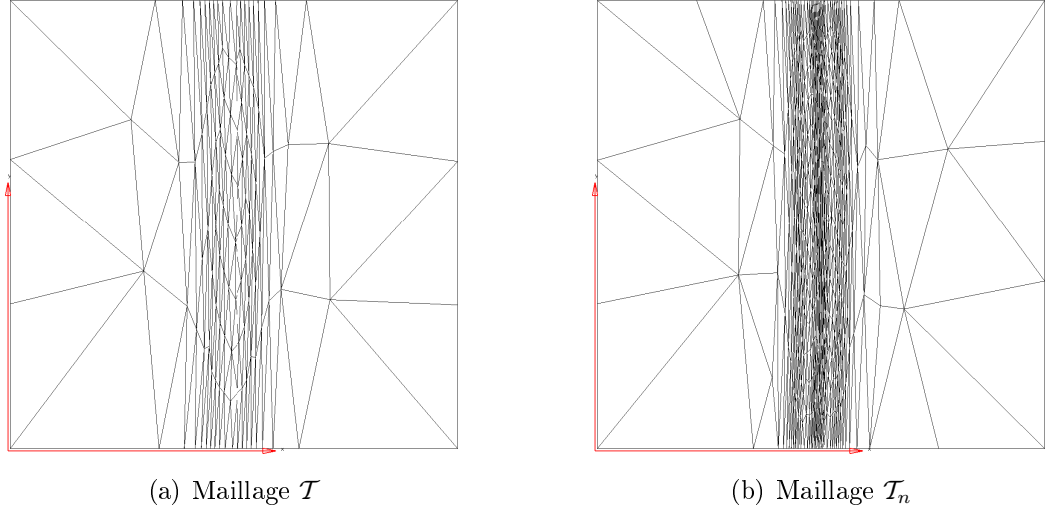


Figure 2.10: Les deux maillages anisotropes utilisés pour effectuer les tests de convergence sur la normale et la courbure, \mathcal{T} est adapté par une métrique basée sur la quantité $\nabla^2(H_\epsilon)$ et \mathcal{T}_n est adapté par une métrique basée sur la quantité $\nabla^2(\nabla H_\epsilon \cdot \nabla H_\epsilon)$

l'interface. Le calcul d'une métrique basée sur le hessien n'est pas le meilleur choix. Nous utilisons un deuxième maillage adapté pour le hessien de la régularisation de la fonction de Dirac, approximé par la norme du gradient. Une norme n'étant pas différentiable à l'origine, nous choisissons naturellement de calculer le hessien sur le carré de la norme du gradient de la pseudo-concentration (cf. figure 2.10(b)). Les figures 2.11(a) et 2.11(b) sont des agrandissements permettant de mieux apprécier la distribution de la taille des éléments. Les figures 2.12(a) et 2.12(b) fournissent une comparaison des opérateurs $\overline{\nabla}_{N,t}^{k,k+1}$ et $\widetilde{\nabla}_{N,q}^{k,k+1}$. On voit clairement que l'opérateur $\widetilde{\nabla}_{N,q}^{k,k+1}$ devient instable avec l'augmentation du paramètre k , et donc du nombre de points du système aux moindres carrés. Les figures 2.13(a) et 2.13(b) fournissent une comparaison des opérateurs $\overline{\nabla}_{N,t}^{k,k+1}$ et $\widetilde{\nabla}_{Z,t}^{k,k}$. L'opérateur $\widetilde{\nabla}_{Z,t}^{k,k}$ est très visiblement plus précis. Nous remarquons également que le maillage \mathcal{T}_δ , avec une résolution très fine à l'interface, conduit à des convergences plus stables, à l'exception de l'opérateur $\widetilde{\nabla N}$. La convergence de l'erreur du gradient calculé avec l'opérateur

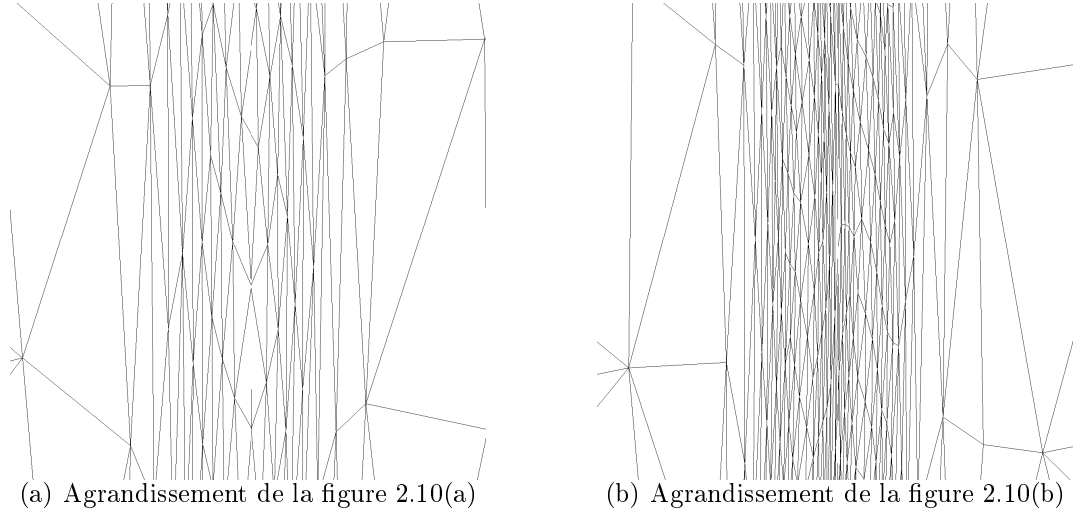


Figure 2.11: Agrandissement sur un voisinage de l'interface des deux maillages anisotropes pour effectuer les tests de convergence sur la normale et la courbure.

$\tilde{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la figure 2.12(d) (cf. tableau 2.4 pour les ratios de convergence), la convergence de l'erreur du gradient calculé avec l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la figure 2.13(c) (cf. tableau 2.3 pour les ratios de convergence) et la convergence de l'erreur du gradient calculé avec l'opérateur $\bar{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la figure 2.13(d) (cf. tableau 2.5 pour les ratios de convergence).

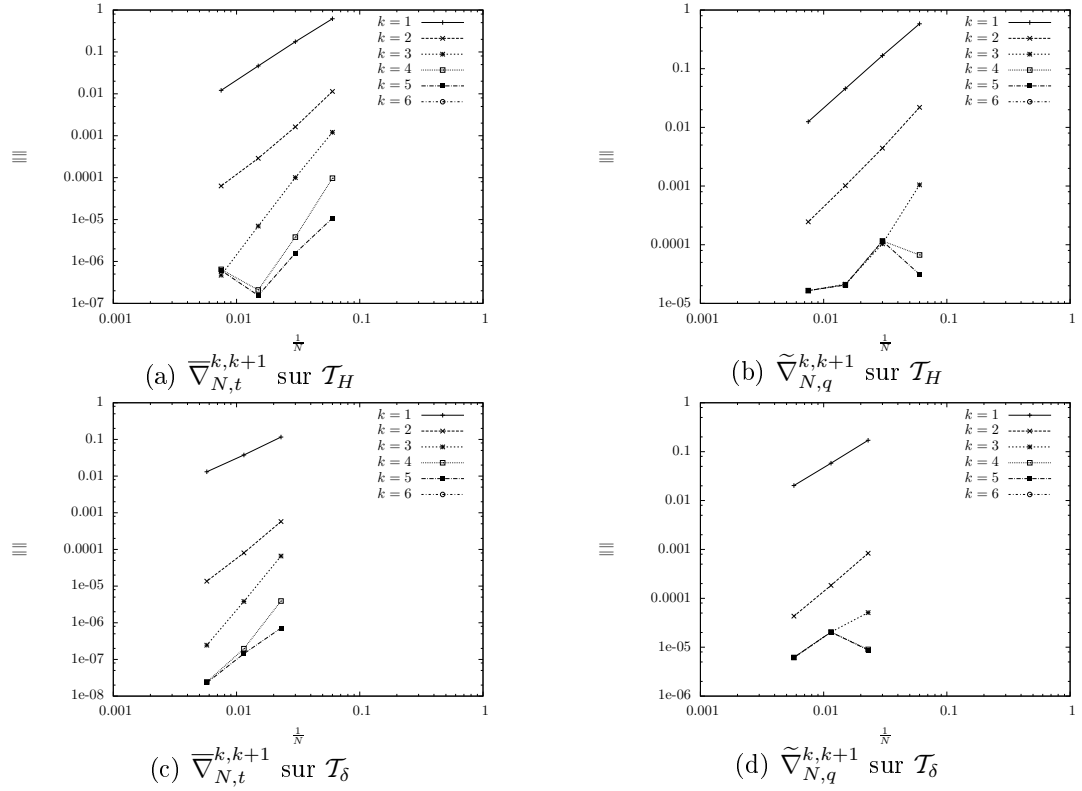


Figure 2.12: Comparaison des erreurs d'approximation du gradient (2.59) pour les opérateurs $\bar{\nabla}_{N,t}$ et $\tilde{\nabla}_{N,q}$. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$.

Tableau 2.3: Ratios de convergence sur l'erreur du gradient en norme L^2 pour $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ , (cf. figure 2.13(c)).

k	$i = 1$	$i = 2$
1	1,62	1,51
2	2,83	2,56
3	4,10	3,96
4	4,32	3,01
5	2,31	2,63

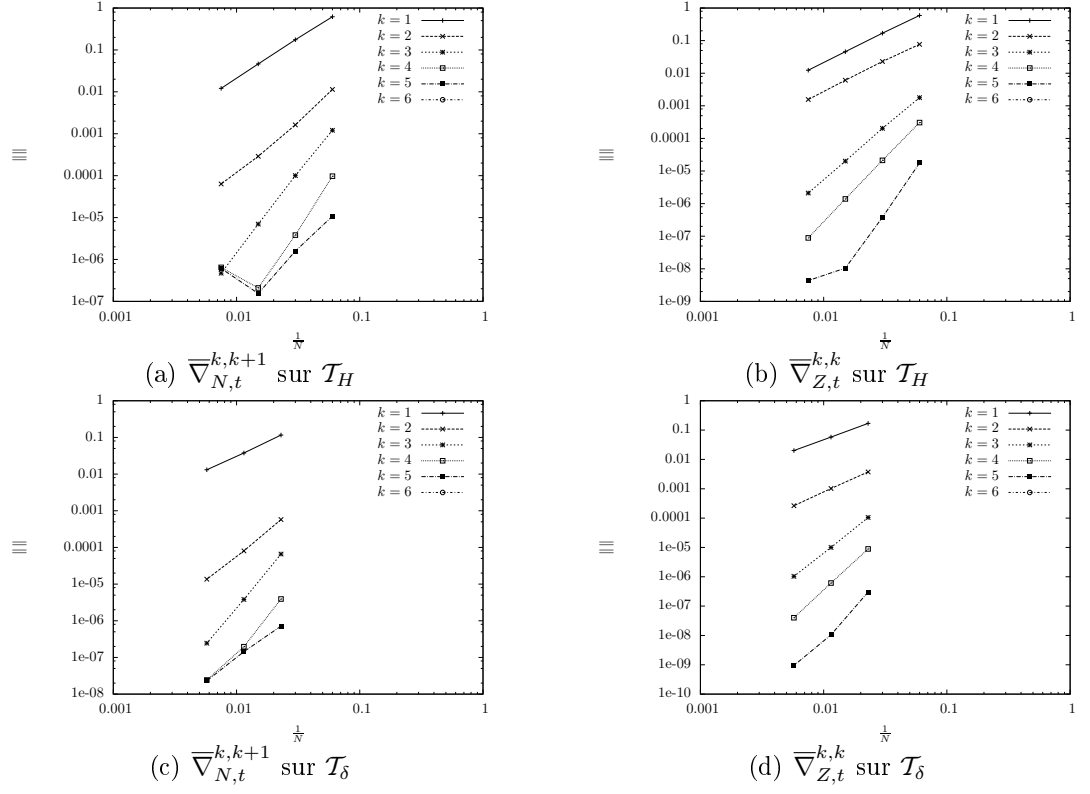


Figure 2.13: Comparaison des erreurs d'approximation du gradient pour les opérateurs $\bar{\nabla}_{N,t}$ et $\bar{\nabla}_{Z,t}$. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$.

Tableau 2.4: Ratios de convergence sur l'erreur du gradient en norme L^2 pour $\tilde{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ , (cf. figure 2.12(d)).

k	$i = 1$	$i = 2$
1	1,56	1,52
2	2,18	2,09
3	1,32	1,73
4	-1,18	1,73
5	-1,22	1,73

Tableau 2.5: Ratios de convergence sur l'erreur du gradient en norme L^2 pour $\overline{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ , (cf. figure 2.13(d)).

k	$i = 1$	$i = 2$
1	1,56	1,52
2	1,88	1,95
3	3,40	3,27
4	3,86	3,93
5	4,85	3,47

La seconde approche, inspirée par Zienkiewicz et Zhu, consiste à appliquer l'opérateur de quasi-interpolation $Q_h^{k,r}$ sur $\nabla I_h^k f$:

$$\begin{aligned} \nabla_Z^k : W_h^k &\longrightarrow V_h^k \otimes V_h^k \\ f &\longmapsto \nabla_Z f = Q_h^{k,r}(\nabla I_h^k f). \end{aligned} \quad (2.51)$$

De façon similaire, nous définissons les opérateurs :

$$\overline{\nabla}_{Z,q}^{k,r} = \overline{Q}_q^{k,r}(\nabla I_h^k f); \quad (2.52)$$

$$\overline{\nabla}_{Z,t}^{k,r} = \overline{Q}_t^{k,r}(\nabla I_h^k f); \quad (2.53)$$

$$\widetilde{\nabla}_{Z,q}^{k,r} = \widetilde{Q}_q^{k,r}(\nabla I_h^k f); \quad (2.54)$$

$$\widetilde{\nabla}_{Z,t}^{k,r} = \widetilde{Q}_t^{k,r}(\nabla I_h^k f). \quad (2.55)$$

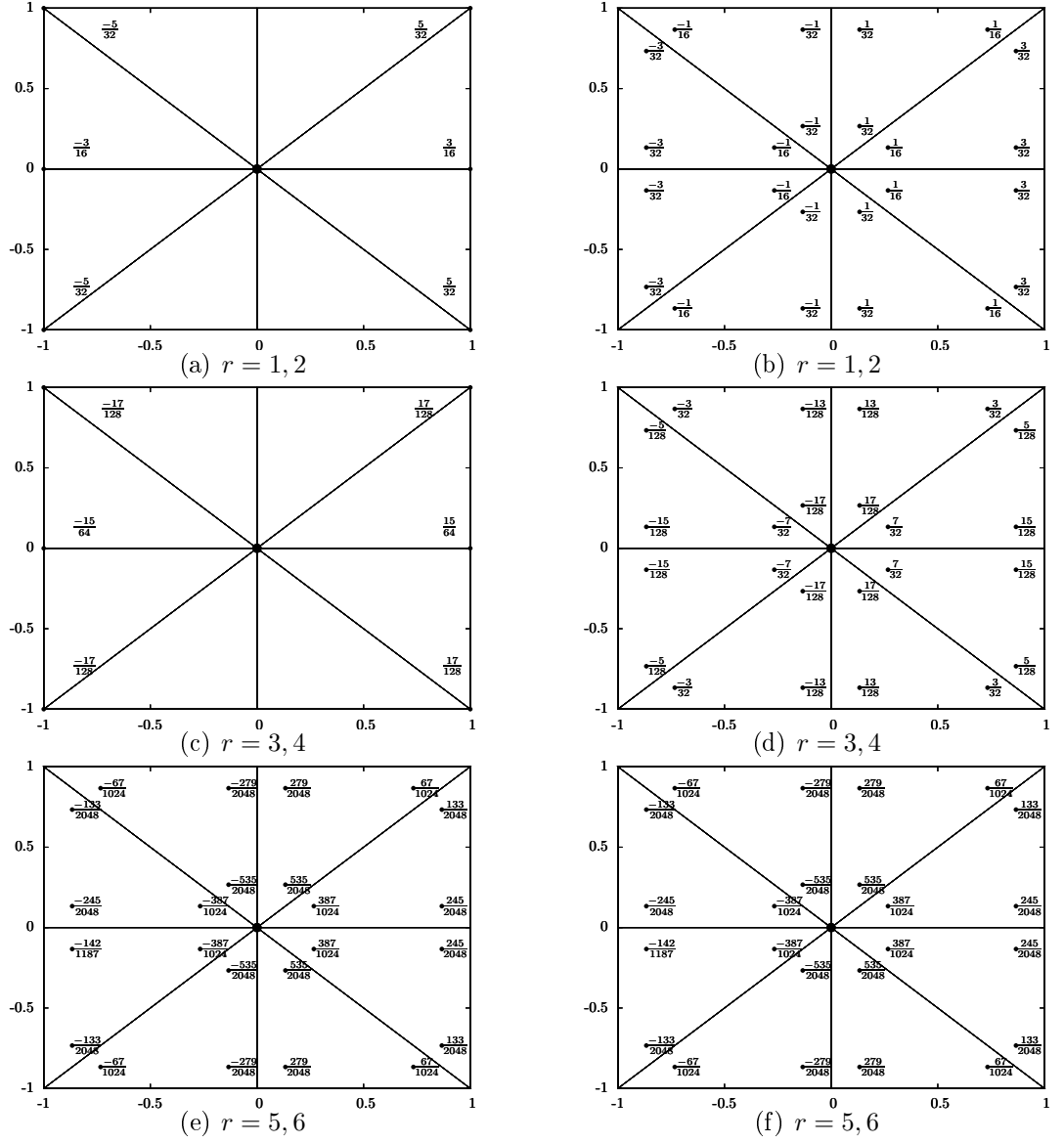


Figure 2.14: Pondération des valeurs nodales discontinues pour la première composante de $\tilde{\nabla}_{N,t}^{1,r}$ au point milieu

Discrétisation globale de l'opérateur

On se donne une fonction $f \in W_h^1$, et nous proposons de construire la représentation matricielle du calcul de la dérivée partielle en x sur la cellule illustrée à la figure 2.7.

Remarque 2.11 La propriété $V_h^0 \subset \text{Ker}(\nabla)$ est un élément de validation qui se traduit par $\|\nabla\|_\infty = 0$.

Tableau 2.6: Coefficients w_j obtenus pour les méthodes $\tilde{\nabla}_{N,q}^{1,r}$ et $\tilde{\nabla}_{N,t}^{1,r}$, la méthode $\bar{\nabla}_{N,q}^{1,r}$ et la méthode $\bar{\nabla}_{N,t}^{1,r}$

r	w_1	w_2	w_3	r	w_1	w_2	w_3	r	w_1	w_2	w_3
1	$\frac{5}{16}$	$\frac{6}{16}$	$\frac{5}{16}$	1	$\frac{5}{16}$	$\frac{6}{16}$	$\frac{5}{16}$	1	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
2	$\frac{17}{54}$	$\frac{20}{54}$	$\frac{17}{54}$	2	$\frac{17}{54}$	$\frac{20}{54}$	$\frac{17}{54}$	2	$\frac{13}{40}$	$\frac{14}{40}$	$\frac{13}{40}$
3	$\frac{66}{241}$	$\frac{109}{241}$	$\frac{66}{241}$	3	$\frac{66}{241}$	$\frac{109}{241}$	$\frac{66}{241}$	3	$\frac{1541}{5822}$	$\frac{2740}{5822}$	$\frac{1541}{5822}$
4	$\frac{329}{1200}$	$\frac{542}{1200}$	$\frac{329}{1200}$	4	$\frac{329}{1200}$	$\frac{542}{1200}$	$\frac{329}{1200}$	4	$\frac{472}{1775}$	$\frac{831}{1775}$	$\frac{472}{1775}$

Nous obtenons

$$(\tilde{\partial}_{x,N}f)(\mathbf{0}) = \frac{5}{16} \left(\frac{(f_{1,1} - f_{-1,1})}{2h} \right) + \frac{6}{16} \left(\frac{(f_{1,0} - f_{-1,0})}{2h} \right) + \frac{5}{16} \left(\frac{(f_{1,-1} - f_{-1,-1})}{2h} \right)$$

où on aura reconnu une combinaison affine des dérivées calculées par un schéma de type différences-finies centré d'ordre 2. On peut considérer cette pondération comme un lissage appliqué a posteriori sur le gradient calculé par différences-finies, où l'inverse, i.e. le calcul du gradient par différences-finies sur une fonction préalablement lissée puisque les opérateurs de différences-finies sont des opérateurs linéaires.

En faisant varier r nous obtenons différentes pondérations :

$$(\tilde{\partial}_{x,N}f)(\mathbf{0}) = w_0 \left(\frac{(f_{1,1} - f_{-1,1})}{2h} \right) + w_1 \left(\frac{(f_{1,0} - f_{-1,0})}{2h} \right) + w_2 \left(\frac{(f_{1,-1} - f_{-1,-1})}{2h} \right),$$

où (w_0, w_1, w_2) est un triplet tel que $w_0 + w_1 + w_2 = 1$.

Tableau 2.7: Coefficients w_0, w_1, w_2 obtenus pour les opérateurs $\tilde{\nabla}_{N,q}^{1,r}$ et $\tilde{\nabla}_{N,t}^{1,r}$ sur le point $(-1, 0)$.

r	$f_{-1,-1}$	$f_{-1,0}$	$f_{-1,1}$	$f_{0,0}$
1	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{4}$	1
2	$\frac{1}{8}$	$-\frac{5}{4}$	$\frac{1}{8}$	1
3	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{4}$	1
4	$\frac{7}{32}$	$-\frac{23}{16}$	$\frac{7}{32}$	1
5	$-\frac{161}{512}$	$-\frac{190}{512}$	$-\frac{161}{512}$	1

Pour les différentes méthodes énumérées précédemment, le tableau 2.6 nous donne les coefficients obtenus pour le point milieu du maillage illustré à la figure 2.7, et les tableaux 2.7 et 2.8 nous donnent les coefficients obtenus pour le point milieu gauche. Avec un voisinage de niveau $\ell = 1$ pour calculer les approximations locales aux sens des moindres carrés, on remarque que le schéma obtenu est un schéma de type différences-finies décentré d'ordre 1 :

$$(\tilde{\partial}_{x,N}f)(-1, 0) = \frac{f_{0,0} - (w_0 f_{-1,-1} + w_1 f_{-1,0} + w_2 f_{-1,1})}{h}.$$

L'utilisation des projections orthogonales mène à des schémas incluant un lissage puisqu'on peut remarquer au tableau 2.7 que (w_0, w_1, w_2) est encore un triplet tel que $w_0 + w_1 + w_2 = 1$. Cependant cette propriété est perdue avec l'opérateur ∇_Z (cf. tableau 2.8). Notons que nous pouvons vérifier la relation $\|\nabla\|_\infty = 0$.

Tableau 2.8: Coefficients w_j obtenus pour les opérateurs $\tilde{\nabla}_{Z,q}^{1,r}$, $\overline{\nabla}_{N,q}^{1,r}$, $\overline{\nabla}_{N,t}^{1,r}$ sur le point $(-1, 0)$.

r	$f_{-1,-1}$	$f_{-1,0}$	$f_{-1,1}$	$f_{0,0}$
-	0	-1	0	1

Remarques sur l'utilisation pratique des opérateurs de dérivation

Le coût algorithmique des opérateurs de dérivation n'est pas un aspect négligeable. En se basant simplement sur le nombre de points par élément (et le calcul de la pondération) pris en compte pour formuler l'approximation locale, le tableau 2.9 présente les opérateurs par ordre de performance.

Tableau 2.9: Nombre de points, en fonction de r , définis sur l'élément de référence pour paramétrer le problème d'approximation locale au sens des moindres carrés utilisant une décomposition SVD

∇	m_r
$\overline{\nabla}_t$	$\frac{(r+1)(r+2)}{2}$
$\tilde{\nabla}_t$	$\frac{(r+1)(r+2)}{2}$
$\overline{\nabla}_q$	$(r+1)^2$
$\tilde{\nabla}_q$	$(r+1)^2$

Il est clair que la décomposition en valeurs singulières, où même l'utilisation d'un algorithme de Householder, sur une matrice de taille $(Nm_r) \times (\frac{(r+1)(r+2)}{2})$ où N

est le nombre d'éléments de la cellule concernée, a un coût non négligeable. Les opérateurs de projection orthogonale $\tilde{\Pi}$ sont des opérateurs bien posés dans le sens où la solution du problème de minimisation est unique. On peut ainsi résoudre le système linéaire ayant pour matrice $A^T A$ qui est de dimension $n_r \times n_r$. Il est évident que dans ce cas, si la recherche de performance est essentielle, il est contre-indiqué de calculer $A^T A$ à partir de A , voire même d'utiliser quelque formule de quadrature en se basant sur

$$\int_{\mathcal{B}_z} \psi_i \psi_j d\mathcal{B} = \sum_{K \in \mathcal{B}_z} 2|K| (I_h^r(\psi_i(\mathbf{x} - \mathbf{z})))^T \mathbf{M} (I_h^r(\psi_j(\mathbf{x} - \mathbf{z}))),$$

où nous avons

$$M_{ij} = \int_{\hat{K}} \hat{N}_j^r \hat{N}_i^r d\hat{K},$$

et $(I_h^r(\psi_j(\mathbf{x} - \mathbf{z})))$ qui représente le vecteur des coordonnées de l'interpolation de $\psi_j(\mathbf{x} - \mathbf{z})$ dans la base de Lagrange de l'élément K . Notons que dans le cas de l'opérateur $\tilde{\nabla}_t$, nous avons $\mathbf{M} = \mathbf{I}$.

L'opérateur $\bar{\Pi}_q$ est aussi bien posé, mais ce n'est pas le cas de l'opérateur $\bar{\Pi}_t$, ou du moins dans la version générale de cet opérateur, pour traiter les fonctions discontinues, c'est à dire en incluant la redondance des points contenus dans la réunion des treillis des éléments de la cellule. On ne peut pas se soustraire à une résolution plus sophistiquée (SVD) puisque le rang n'est pas maximal.

Lors d'une simulation numérique, les opérateurs de dérivation sont appliqués sur des fonctions discrètes issus d'une résolution approchée des équations du problème considéré. Si ces opérateurs sont utilisés très fréquemment, dans notre cas à chaque itération de Newton, alors il y a un intérêt à calculer la représentation matricielle globale, telle que décrite précédemment, pour des raisons de performance. Il y a cependant un coût mémoire à assumer puisqu'en plus de stocker deux matrices

supplémentaires pour le calcul de chacune des composantes du gradient, ces matrices sont plus denses que si ces matrices avaient été construites avec une méthode de Galerkin. La construction des matrices représentatives des opérateurs définis sur W_h^k et à valeurs dans W_h^k est contre-indiquée. Notons qu'avec l'utilisation de l'opérateur ∇_Z et dans le cas où $f_h \in V_h^k$, alors deux options s'offrent à nous. La première option est de considérer l'opérateur de dérivation de V_h^k dans $V_h^k \times V_h^k$ et ainsi construire deux matrices représentatives de $\partial_{Z,x}$ et $\partial_{Z,y}$, et dont la dimension de chacune de ces matrices est $|V_h^k| \times |V_h^k|$. La seconde option est de considérer l'opérateur ∇_Z comme un lissage appliqué sur ∇f_h et défini de $W_h^{k-1} \times W_h^{k-1}$ dans $V_h^k \times V_h^k$. On peut ainsi ne construire qu'une seule matrice représentative de l'application ∇_Z de dimension $|V_h^k| \times |W_h^{k-1}|$.

Notons également que si le maillage est modifié, alors les matrices globales sont à reconstruire. Il est donc conseillé de n'utiliser les matrices globales que dans le cas où le maillage n'est pas modifié fréquemment, comme par exemple à chaque n pas de temps où n est petit.

2.3 Application au calcul de la force volumique

On fixe ϵ , et on se munit d'une surface libre Γ vérifiant la condition (2.3) :

$$\max_{\Gamma} |\kappa| < \frac{1}{\epsilon}.$$

Le calcul de la force volumique capillaire \mathbf{f}_{Γ} (1.65),

$$\mathbf{f}_{\Gamma}^H = -\alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla H_{\epsilon}}{\|\nabla H_{\epsilon}\|} \right) \nabla H_{\epsilon},$$

demande le calcul de la normale \mathbf{n}_Γ et le calcul de la courbure à l'interface $\kappa_\Gamma(\mathbf{n}_\Gamma)$. Avec une approximation de $f_h = I_h^k H_\epsilon \in V_h^k$, où $k \geq 2$, ainsi que l'utilisation de l'opérateur gradient classique, nous obtenons une force volumique polynomiale de degré $2k - 3$ et dont l'erreur vérifie

$$\left\| \mathbf{f}_\Gamma^H - \alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla f_h}{\|\nabla f_h\|} \right) \nabla f_h \right\| \approx O(h^{k-1}).$$

Avec cette relation, l'utilisation d'un interpolant linéaire est à exclure.

Grâce à l'utilisation des opérateurs de dérivation introduits à la section précédente, nous sommes en mesure de faire mieux et de proposer un calcul précis à l'ordre k :

$$\left\| \mathbf{f}_\Gamma^H - \alpha \left(\tilde{\nabla} \cdot \frac{\tilde{\nabla} f_h}{\|\tilde{\nabla} f_h\|} \right) \tilde{\nabla} f_h \right\| \approx O(h^k).$$

L'objectif de cette section est de présenter les difficultés présentes dans ce calcul et de vérifier ce taux de convergence sur quelques exemples.

2.3.1 Le calcul de la normale

Dans le cas de la méthode de la pseudo-concentration, la normale s'exprime sous la forme :

$$\mathbf{n}_\Gamma = \frac{\nabla H_\epsilon}{\|\nabla H_\epsilon\|}.$$

À la première section de ce chapitre, nous avons vu un ensemble de définitions possibles de $H_\epsilon^{m,p}$ avec m et p deux entiers désignant le nombre m de moments annulés et le degré de continuité p . Lorsque $H_\epsilon^{m,p}$ n'est pas monotone, ce qui est le

cas pour $m > 0$, alors le calcul de la normale s'exprime sous la forme :

$$\frac{\nabla H_\epsilon^{m,p}(\phi)}{|\nabla H_\epsilon^{m,p}(\phi)|} = \frac{v'(\phi)\nabla\phi}{|v'(\phi)||\nabla\phi|} = \pm \mathbf{n}_\Gamma.$$

Avec une telle régularisation, la normale obtenue contient des changements de signe dans la région de transition Ω_ϵ (cf. figure 2.15), ce qui rend irréalisable un calcul précis de la courbure en utilisant l'opérateur de divergence. Remarquons à la figure 2.15 que la qualité de l'approximation de la normale au bord est médiocre. Nous avons utilisé un opérateur de quasi-interpolation de niveau $\ell = 1$. Cet exemple illustre très bien l'importance d'une stratégie spécifique sur le bord, et une technique communément utilisée est de considérer des supports $\sigma_i = \mathcal{B}_z^{\ell>1}$ si $\mathbf{z} \in \partial\mathcal{T}_h$. On se place dans l'espace $W_h^k(\Omega)$ et on pose $f_h = I_h^k H_\epsilon$. Le calcul discret de \mathbf{n}_Γ s'exprime sous la forme

$$\mathbf{n}_h^k = I_h^k \left(\frac{\nabla f_h}{\|\nabla f_h\|} \right),$$

avec pour précision

$$\|\mathbf{n}_\Gamma - \mathbf{n}_h^k\|_{K,\infty} \approx O(h^k), \quad K \subset \Omega_\epsilon. \quad (2.56)$$

En se basant sur les différents opérateurs de dérivation introduits à la section précédente, on définit

$$\mathbf{n}_N^k = I_h^k \left(\frac{\nabla_N f_h}{\|\nabla_N f_h\|} \right),$$

où ∇_N est l'opérateur de dérivation proposé par Zhang et Naga (2005), ainsi que

$$\mathbf{n}_Z^k = I_h^k \left(\frac{\nabla_Z f_h}{\|\nabla_Z f_h\|} \right),$$

où ∇_Z est l'opérateur de dérivation basé sur l'approche proposée par Zienkiewicz et Zhu (1992).

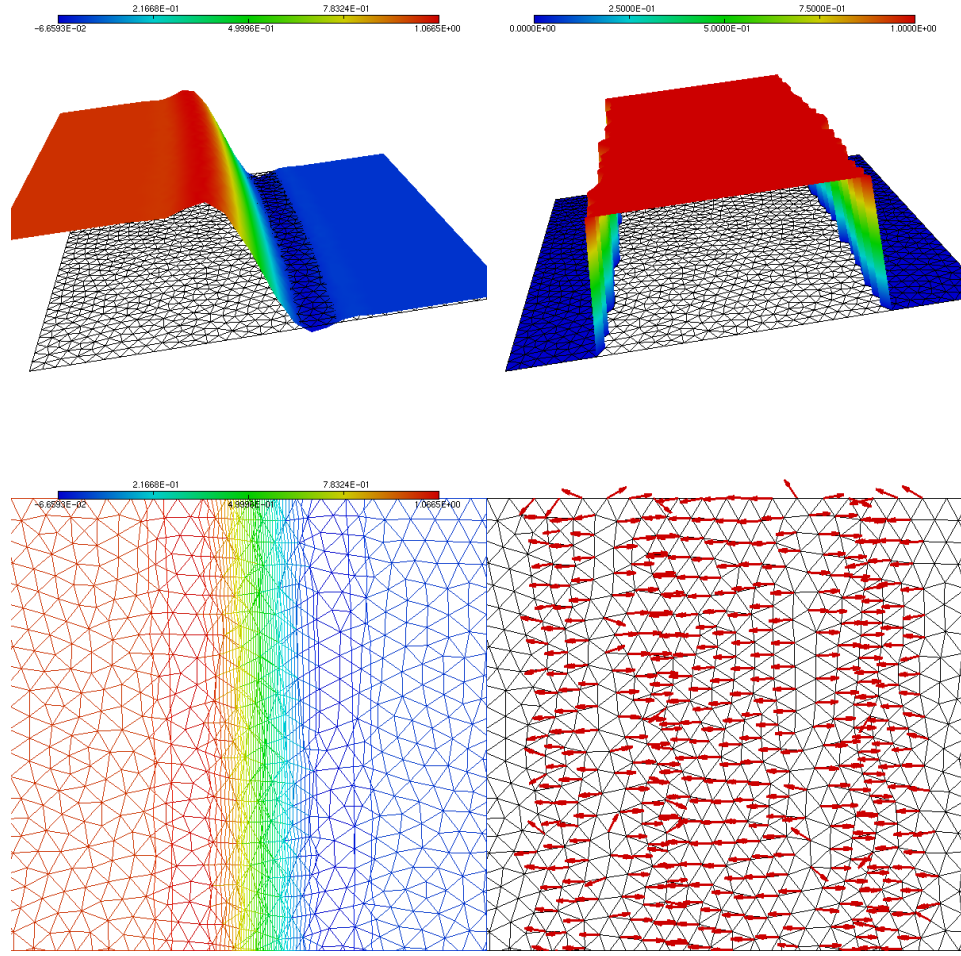


Figure 2.15: Illustration du calcul de la normale avec l'utilisation d'une régularisation $H^{4,3}_{\frac{1}{4}}$. La première colonne représente le graphe et la distribution des isovaleurs de la pseudo-concentration et la colonne de droite représente la norme de la normale et sa représentation vectorielle illustrant les inversions de signe.

Les mesures d'erreurs sont effectuées dans les espaces $L_2(\Omega)$ et $L_\infty(\Omega)$ munis de normes pondérées par une régularisation de la fonction de Dirac à l'interface afin de limiter la mesure dans un voisinage de celle-ci :

$$\|\mathbf{n}\|_{L_{2,\eta}}^2 = \int_{\Omega} \delta_{\Gamma,\eta} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} d\Omega; \quad (2.57)$$

$$\|\mathbf{n}\|_{\infty,\eta} = \max_{x \in \Omega} \delta_{\Gamma,\eta} |\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}|. \quad (2.58)$$

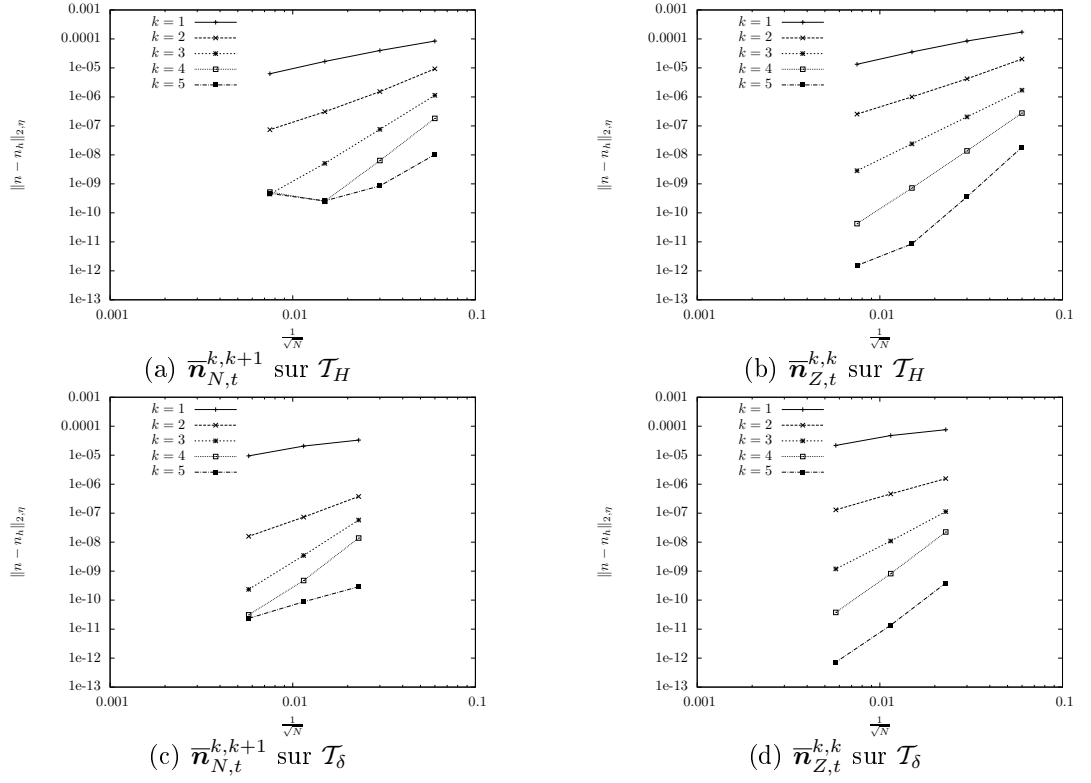


Figure 2.16: Erreur d'approximation de la normale (2.59) à l'aide de l'approximation du gradient par reconstruction du développement de Taylor. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$.

La règle de quadrature utilisée pour évaluer ces normes possède 100 points par élément.

La figure 2.16(a) illustre les taux de convergence de la quantité

$$\|n_\Gamma - \bar{\nabla}(I_h^k(H_\epsilon(\phi)))\|_{2,\eta}. \quad (2.59)$$

Tableau 2.10: Ratios de convergence de l'erreur $\|n - n_h\|_2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_H (cf. figure 2.16(a)).

k	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$
1	1,08	1,25	1,41
2	2,61	2,31	2,06
3	3,90	3,90	3,52
4	4,82	4,68	-1,06
5	3,59	1,71	-0,85

Tableau 2.11: Ratios de convergence de l'erreur $\|n - n_h\|_2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ (cf. figure 2.16(c)).

k	$i = 1$	$i = 2$
1	0,69	1,13
2	2,36	2,20
3	4,07	3,88
4	4,87	3,93
5	1,73	1,90

Tableau 2.12: Ratios de convergence de l'erreur $\|n - n_h\|_2$ pour l'opérateur $\overline{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ (cf. figure 2.16(d))

k	$i = 1$	$i = 2$
1	0,67	1,13
2	1,75	1,82
3	3,37	3,20
4	4,77	4,45
5	4,83	4,25

La convergence de l'erreur de la normale calculée avec l'opérateur $\overline{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_H est illustrée à la figure 2.16(a) (cf. tableau 2.10 pour les ratios de convergence). La convergence de l'erreur de la normale calculée avec l'opérateur $\overline{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la figure 2.16(c) (cf. tableau 2.11 pour les ratios de convergence). La convergence de l'erreur de la normale calculée avec l'opérateur $\overline{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la figure 2.16(d) (cf. tableau 2.12 pour les ratios de convergence).

2.3.2 Le calcul de la courbure

Avec la méthode de la pseudo-concentration, la problématique du calcul de la courbure est la suivante : calculer la divergence d'un champ de vecteurs dont la norme est discontinue. En effet, par définition le calcul de la normale \mathbf{n}_Γ basée sur

la pseudo-concentration vérifie l'équation

$$\mathbf{n}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \begin{cases} 0, & t > \epsilon; \\ 0, & t < -\epsilon; \\ 1, & |t| < \epsilon. \end{cases} \quad (2.60)$$

Le calcul de la courbure $\kappa_\Gamma(\mathbf{n}_\Gamma) = \nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma$ est donc un problème sur le domaine d'influence des éléments $K \in \mathcal{T}$ intersectés par les lignes de niveaux $\pm\epsilon$ de la fonction distance signée ϕ_Γ :

$$K_{\pm\epsilon} = \{K \in \mathcal{T} \mid \exists \mathbf{x} \in K, \quad |\phi_\Gamma(\mathbf{x})| = \epsilon\}. \quad (2.61)$$

L'application des opérateurs de dérivation impliquant les éléments $K_{\pm\epsilon}$ est numériquement désastreux. Nous pouvons apprécier à la figure 2.17(a) la magnitude du bruit de la courbure calculée sur ces éléments. Cette magnitude est plus importante avec le degré d'approximation k . L'approche que nous proposons pour résoudre ce problème est de supprimer le calcul des dérivées sur les discontinuités. La localisation des éléments $K_{\pm\epsilon}$ est simple et nous modifions l'application des opérateurs de quasi-interpolation de la façon suivante. La projection locale associée à un sommet n'est calculée que si son support ne contient aucun de ces éléments :

$$\tilde{\nabla} f_h = \sum_{j \in \Sigma_h^1, \sigma_i \cap K_{\pm\epsilon} = \emptyset} \Pi_{\sigma_i}^r(f_h) \mathcal{N}_j.$$

La figure 2.17(b) illustre la courbure lorsque celle-ci est calculée selon ce principe. Nous voyons clairement, par rapport à la figure 2.17(b), que les bruits sont entièrement supprimés. La figure 2.17(c) permet d'apprécier une comparaison directe des calculs avec filtre et sans filtre pour le cas quadratique.

Le support de la courbure discrète obtenue est complètement contenu dans le

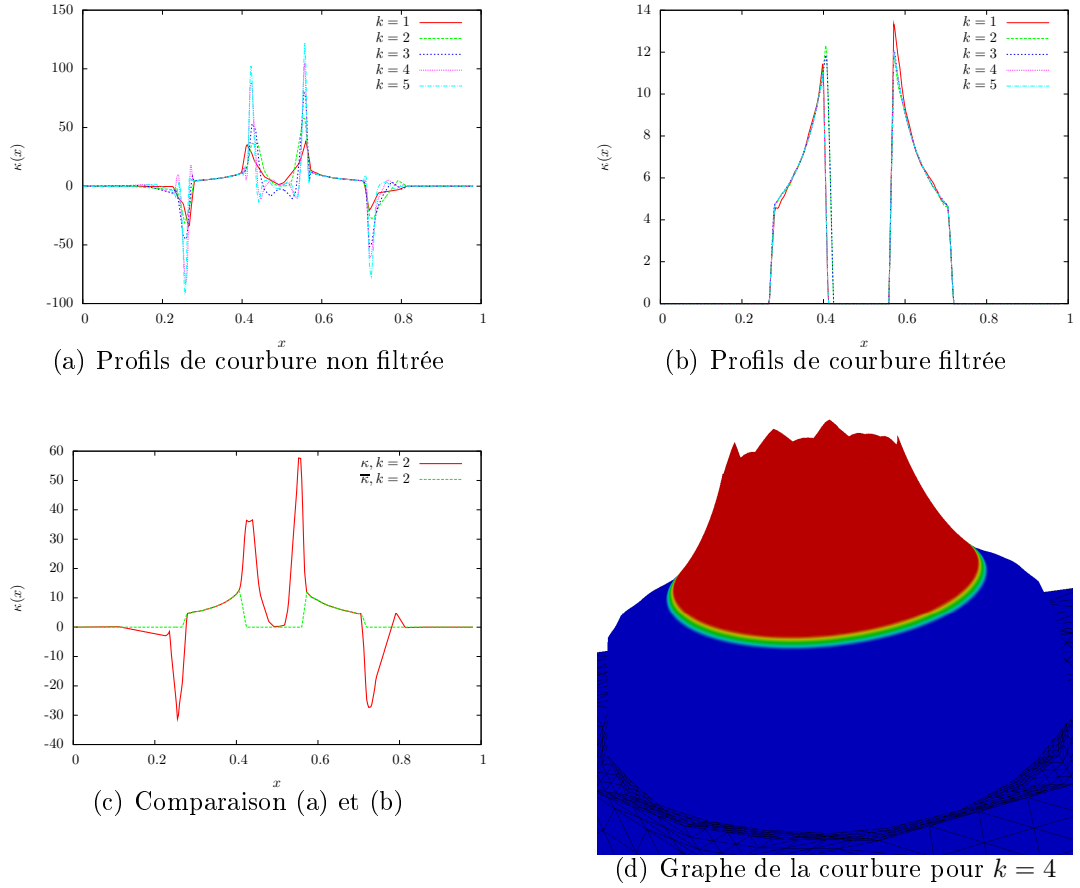


Figure 2.17: Illustration du filtre appliqué au calcul de la courbure d'une interface représentée par un cercle de centre $(\frac{1}{2}, \frac{3}{4})$ et de rayon $r = 0,15$. Nous avons fixé $\frac{1}{8}$, et nous utilisons l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$. Les figures représentent une coupe de la courbure réalisée sur l'axe $y = \frac{3}{4}$, ainsi que le graphe de la courbure pour $k = 4$ où l'échelle de couleur est comprise entre 6.4 et 6.8

voisinage de l'interface Ω_ϵ . Une limitation importante de cette approche est le cas où la résolution du maillage est telle que

$$\sigma_i \cap K_{\pm\epsilon} = \emptyset, \forall \mathbf{z}_i \in \Omega_\epsilon.$$

Si on se ramène au cas en dimension 1, pour $\ell = 1$, au moins 3 noeuds appartenant à Ω_ϵ sont nécessaires afin d'effectuer le calcul. Ceci signifie que dans la direction de la

normale à l'interface, la taille h du maillage doit respecter $2\epsilon > 4h$ et avec l'inégalité (2.3), on peut déduire que pour une taille h fixée du maillage, la courbure maximum de la surface libre que nous sommes en mesure de traiter avec notre algorithme est

$$\max_{\Gamma} |\kappa| < \frac{1}{2h}. \quad (2.62)$$

Remarque 2.12 *L'information sur la courbure est uniquement locale, c'est-à-dire qu'elle ne donne aucune information sur la localisation des axes médians aux surfaces libres : les axes médians dans les entités de fluides et les axes médians entre les entités de fluides. Une forte courbure n'est pas une condition suffisante pour affirmer la proximité d'un axe médian. La proximité d'un axe médian est définie comme la présence d'un point $\mathbf{x} \in \Omega_\epsilon$ tel que sa projection orthogonale sur Γ ne soit pas unique.*

Similairement à la section précédente, nous définissons les opérateurs de courbure suivants :

$$\begin{aligned} \kappa_N &= \nabla_N \cdot \mathbf{n}_N \approx \nabla_N \cdot \frac{\nabla_N I_h^k H_\epsilon}{\|\nabla_N I_h^k H_\epsilon\|}, \\ \kappa_Z &= \nabla_Z \cdot \mathbf{n}_Z \approx \nabla_Z \cdot \frac{\nabla_Z I_h^k H_\epsilon}{\|\nabla_Z I_h^k H_\epsilon\|}. \end{aligned}$$

On effectue un test de convergence similaire au test effectué à la section précédente. Les mesures d'erreurs de la courbure sont effectuées dans les espaces $L_2(\Omega)$ et $L_\infty(\Omega)$:

$$\|\kappa\|_{L_2, \eta}^2 = \int_{\Omega} \delta_{\Gamma, \eta} \kappa \cdot \kappa d\Omega; \quad (2.63)$$

$$\|\kappa\|_{\infty, \eta} = \max_{x \in \Omega} \delta_{\Gamma, \eta} |\kappa \cdot \kappa|, \quad (2.64)$$

avec une règle de quadrature de 100 points par éléments. La convergence de l'erreur de la courbure calculée avec l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la

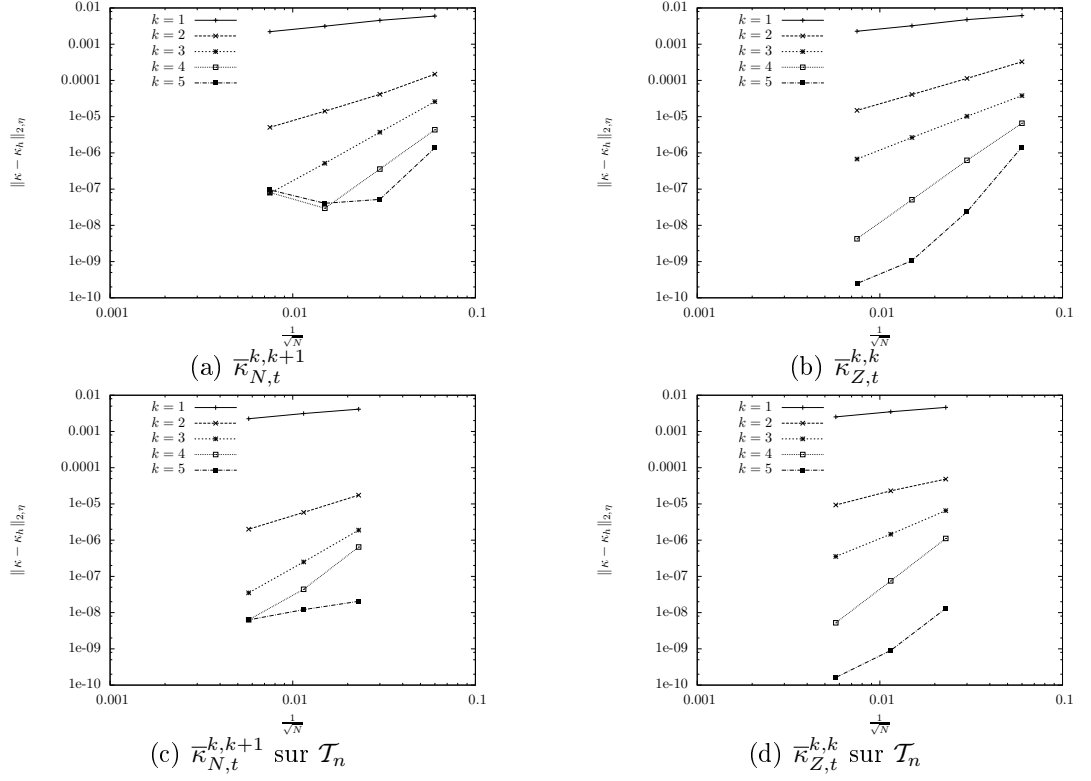


Figure 2.18: Erreur d'approximation de la courbure (2.59) à l'aide de l'approximation du gradient par reconstruction du développement de Taylor. Nous avons posé $\eta = \frac{\epsilon}{2}$.

figure 2.18(c) (cf. tableau 2.13 pour les ratios de convergence). La convergence de l'erreur de la courbure calculée avec l'opérateur $\bar{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ est illustrée à la figure 2.18(d) (cf. tableau 2.14 pour les ratios de convergence).

Tableau 2.13: Ratios de convergence de l'erreur $\|\kappa - \kappa_h\|_2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ (cf. figure 2.18(c))

k	$i = 1$	$i = 2$
1	0.40	0.47
2	1.58	1.54
3	2.92	2.84
4	3.87	2.80
5	0.77	0.94

Tableau 2.14: Ratios de convergence de l'erreur $\|\kappa - \kappa_h\|_2$ pour l'opérateur $\bar{\nabla}_{Z,t}$ sur le maillage \mathcal{T}_δ

k	$i = 1$	$i = 2$
1	0.40	0.47
2	1.08	1.30
3	2.16	2.05
4	3.89	3.85
5	3.85	2.48

2.4 Le problème de Laplace

Nous choisissons ici le problème de Laplace pour mesurer l'impact des régularisations introduites sur l'intensité des courants parasites. La configuration du problème est décrite à la figure 2.19. L'écoulement considéré est sans gravité, les conditions

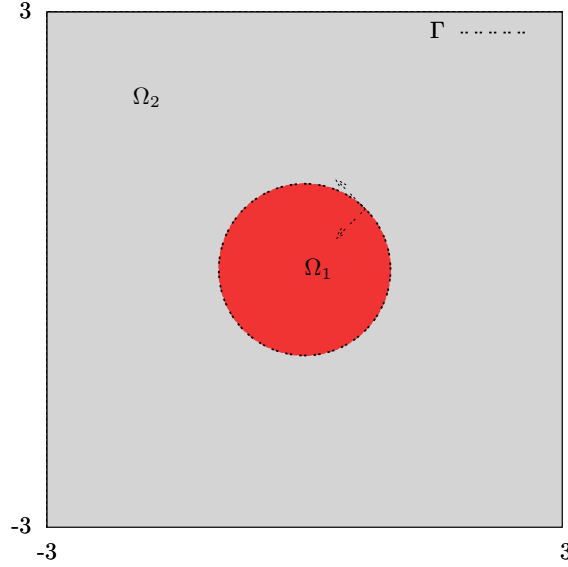


FIG. 2.19: Configuration initiale du problème de Laplace.

aux bords sont nulles et la solution initiale est munie d'un champ de vitesse nul et d'une interface représentée par un cercle de rayon r :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \phi & = & R - \sqrt{x^2 + y^2}; \\ \mathbf{n}(\phi) & = & \frac{(-x, -y)}{\sqrt{x^2 + y^2}}; \\ \kappa(\phi) & = & \frac{-1}{\sqrt{x^2 + y^2}}; \\ \mathbf{f}_V^{m,p} & = & \alpha \kappa(\phi) \delta^{m,p}(\phi) \mathbf{n}(\phi). \end{array} \right.$$

Le gradient de pression est donnée par

$$\nabla P(\mathbf{x}, t = 0) = \frac{\alpha}{R} \mathbf{n}_\Gamma \delta_\epsilon(\phi), \quad (2.65)$$

et cette dernière relation doit être vérifiée pour $\forall t > 0$ si $\mathbf{u}(t) = \mathbf{0}$. On effectue un premier test « analytique », où nous éliminons la dépendance à la pseudo-concentration des équations de Stokes. Nous utilisons un maillage anisotrope tel que $\|H_\epsilon^{m,p} - I_h^1 H_\epsilon^{m,p}\|_\infty < 0,08$. Nous choisissons des ratios de viscosité et densité de 1, et

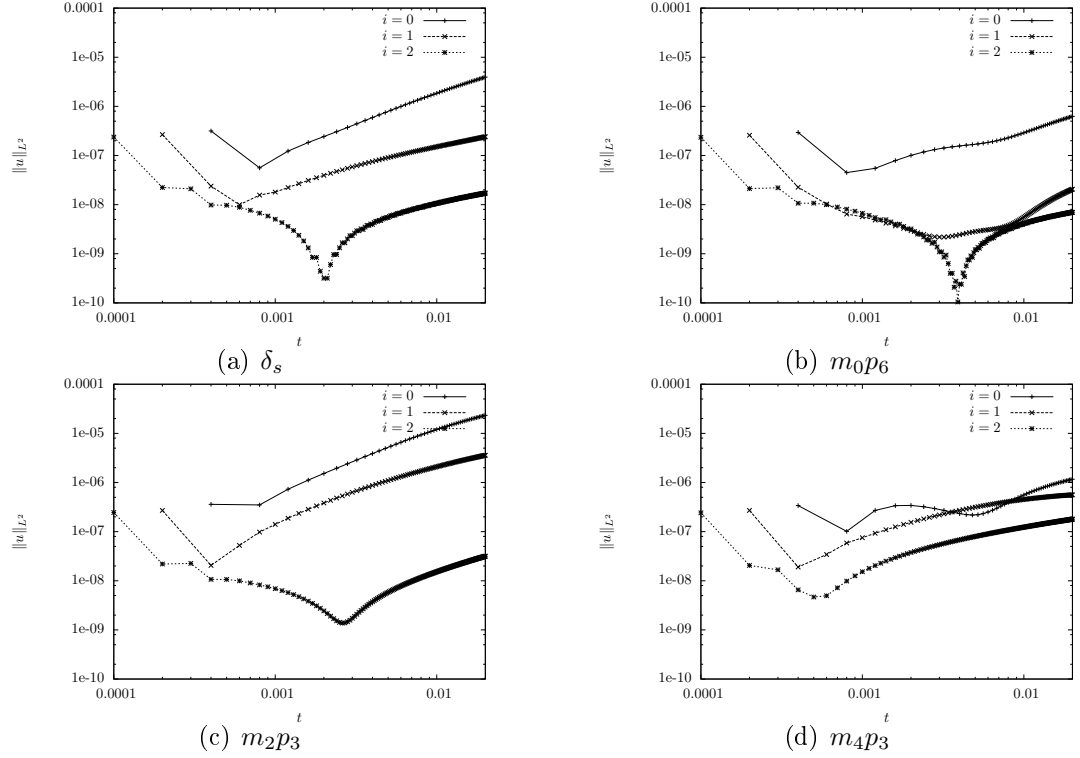


Figure 2.20: Mesure des courants parasites pour le problème de Laplace, l'indice i correspond au niveau de raffinement utilisé ($h_i = 2^{-i}h, \Delta_i t = 2^{-i}\Delta t$)

nous calculons analytiquement le terme $\mathbf{f}_\Gamma^{m,p}$ dans les équations de la conservation de la quantité de mouvement. La variable eulérienne n'est donc plus impliquée. L'illustration de la convergence est effectuée à l'aide d'un raffinement en temps $\Delta_{i+1} = \frac{\Delta_i}{2}$ et en espace $h_{i+1} = \frac{h_i}{2}$. La discrétisation en temps est effectuée à l'aide d'un schéma de Gear. La discrétisation des variables est effectuée avec l'interpolant de Crouzeix-Raviart pour la vitesse et la pression. La valeur du paramètre ϵ est 0,2. Nous mesurons l'intensité des courants parasites avec les normes usuelles sur le champ de vitesse et par une mesure du saut de la pression :

$$\|\mathbf{u}\|_2 = \sqrt{\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\Omega}; \quad (2.66)$$

$$\|p - p_h\|_{\infty} = \left| \left(\max_{\mathbf{x} \in \Omega} p(\mathbf{x}) - \min_{\mathbf{x} \in \Omega} p(\mathbf{x}) \right) - \frac{1}{R} \right|. \quad (2.67)$$

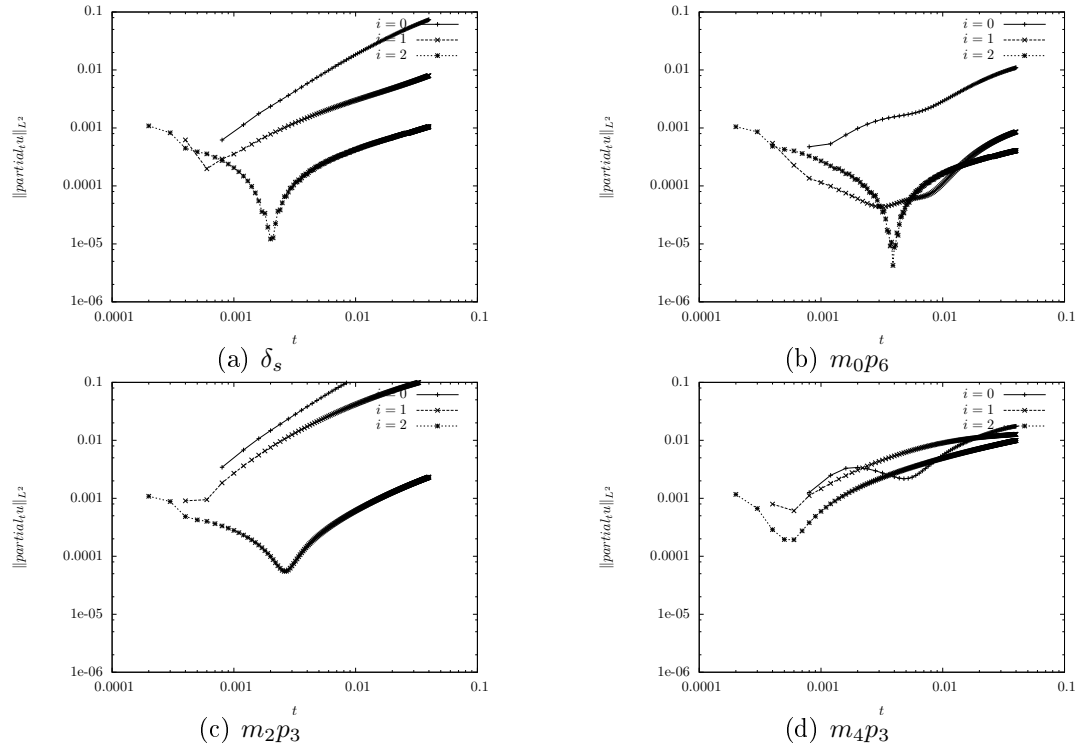


Figure 2.21: Mesure de la dérivée en temps des courants parasites pour le problème de Laplace. L'indice i correspond au niveau de raffinement utilisé ($h_i = 2^{-i}h, \Delta_i t = 2^{-i}\Delta t$)

Nous avons testé 4 régularisations de la fonction de Dirac : δ^s , $\delta^{0,6}$, $\delta^{2,3}$ et $\delta^{4,3}$. Nous faisons ainsi varier le degré de continuité et le nombre de conditions vérifiées sur les moments. Les figures 2.20(a), 2.21(a) et 2.22(a) représentent, pour δ^s , les graphes en fonction du temps de la norme L^2 du champ de vitesse, la norme L^2 de la dérivée en temps du champ de vitesse ainsi que le saut de pression. Chacune de ces figures est accompagnée des mêmes figures relatives aux autres régularisations. La première constatation est une réduction des courants parasites avec le raffinement (espace-temps) du maillage. Nous remarquons également que si le maillage est suffisamment raffiné, alors il existe un t tel que le phénomène soit proche d'un état stationnaire. La norme du champ de vitesse converge vers 0 et la mesure de la dérivée en temps confirme la situation d'équilibre. Cependant, cet équilibre n'est visiblement pas

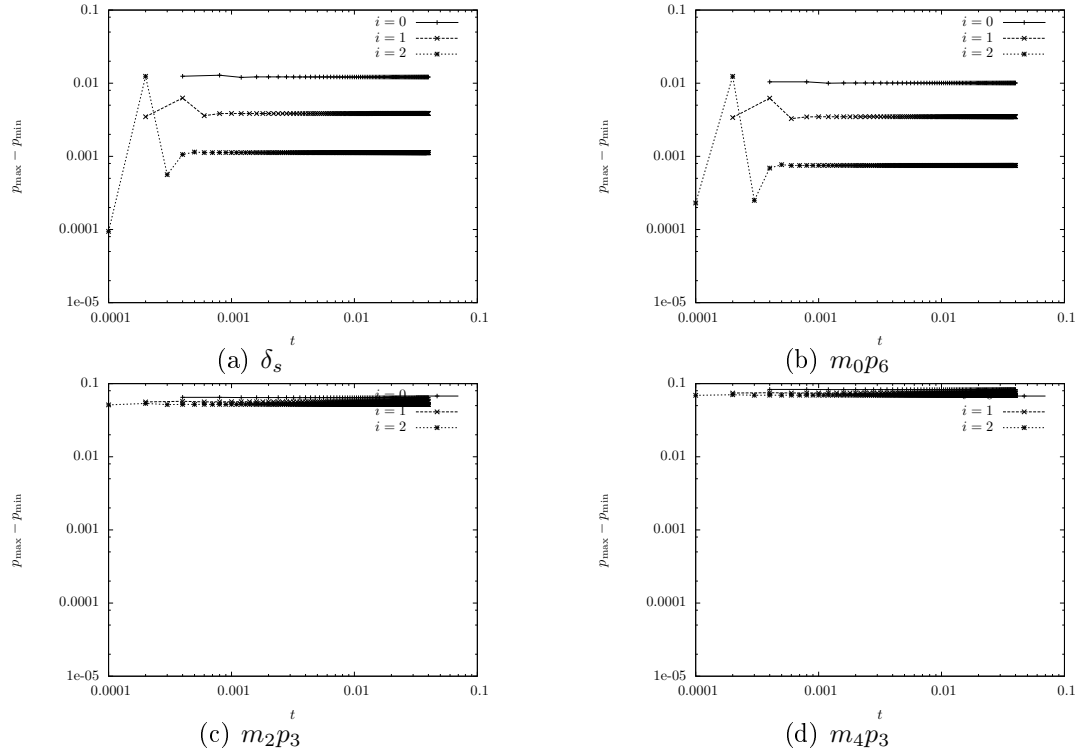


Figure 2.22: Mesure de l'erreur sur le saut de pression pour le problème de Laplace. L'indice i correspond au niveau de raffinement utilisé ($h_i = 2^{-i}h, \Delta_i t = 2^{-i}\Delta t$)

stable puisque nous voyons que le phénomène « numérique » redevient transitoire. Il semble que l'augmentation du degré de continuité de la régularisation traduit une baisse de l'intensité des courants parasites. Les régularisations associées à des moments non nuls donnent des résultats conformes à nos attentes sur la mesure du saut de pression : la pression obtenue (cf. figure 2.20(a)) contient des surdépassements dans le voisinage de l'interface. Il faut aussi remarquer que le saut de pression converge linéairement pour la régularisation de δ^s , ce qui est conforme à la discrétisation linéaire de la pression. Il est important de remarquer que pour le cas associé à la régularisation $\delta^{0,6}$, nous obtenons un meilleur taux de convergence. Il serait intéressant de vérifier si ce taux de convergence est superlinéaire. Ces figures nous indiquent aussi que les régularisations qui possèdent un moment non nul ne

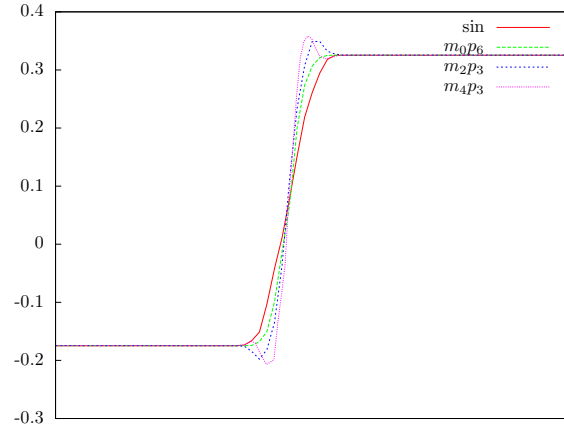


Figure 2.23: Coupe de la pression, selon l'axe $y = 0$, pour le problème de Laplace.

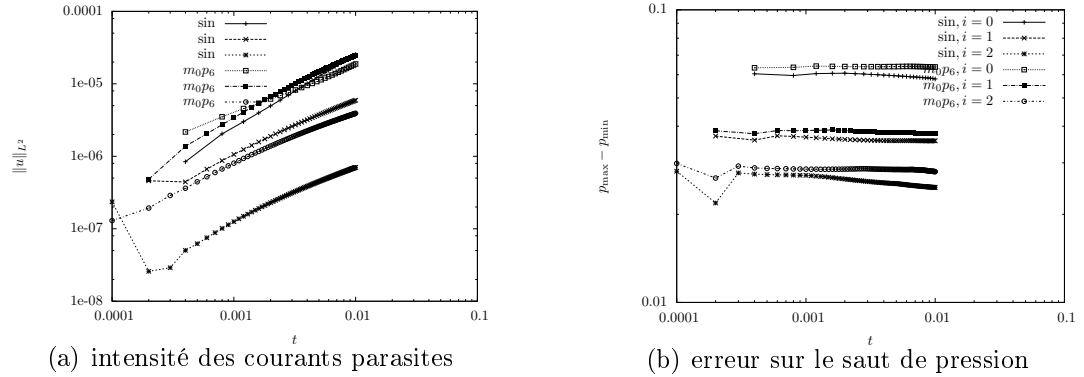


Figure 2.24: Mesures de l'intensité des courants parasites et de l'erreur sur le saut de pression pour le problème de Laplace en utilisant la méthodologie de calcul de la force volumique

sont pas appropriées dans le sens où celles-ci mènent à un résultat où la pression n'est pas précise. Par ailleurs, avec la régularisation $\delta^{0,6}$, nous voyons clairement que le raffinement du maillage améliore peu les résultats. Pour ce test, nous concluons qu'il est préférable d'utiliser une régularisation de la fonction de Dirac qui possède un degré de continuité le plus élevé possible. La positivité de la régularisation est également préférable pour permettre un calcul d'une pression qui ne possèdent pas de « pics » tels qu'illustrés à la figure 2.23 où nous avons réalisé une coupe de la pression sur l'axe $y = 0$ pour appuyer notre propos. Sur cette figure, il est clair que

la régularisation $\delta^{0,6}$ est la plus satisfaisante. La pression est monotone sur la région de transition, comme pour la régularisation δ^s , mais possède l'avantage sur cette dernière d'offrir une diffusion moins importante du gradient de la pression. Nous pouvons aussi constater que pour les régularisations telles que $m > 0$, la pente de la pression à l'interface est plus importante mais celle-ci est accompagnée, comme nous l'avons mentionné, de valeurs indésirables.

Nous traitons maintenant le même problème mais en appliquant la méthodologie de calcul de la force volumique. Nous utilisons un interpolant quadratique pour discrétiser la pseudo-concentration, ainsi que l'opérateur de dérivation $\bar{\nabla}_{N,t}$ pour calculer la normale et la courbure. Les résultats sont illustrés aux figures 2.24(a) et 2.24(b). L'utilisation de régularisation trigonométrique s'avère ici légèrement meilleure si on se fie au ratio de convergence. Le raffinement de la discrétisation conduit à une diminution des courants parasites, mais ne les supprime pas.

2.5 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de proposer une méthodologie de calcul de la force capillaire volumique. Nous avons d'abord présenté un ensemble de définitions possibles des régularisations de la fonction de Heaviside et de la fonction de Dirac. Parmi les régularisations définies par morceaux, nous avons le choix entre une famille de polynômes uniquement basée sur le degré de continuité et une famille de polynômes basée sur le degré de continuité et sur le nombre conditions vérifiées sur les moments. La première famille permet une évaluation consistante de la viscosité et de la densité. Les polynômes sont strictement monotones et sont bien adaptés pour définir la pseudo-concentration. La seconde famille de polynômes possède certes des propriétés élégantes mais ne s'avère adaptée que pour une méthode « level-set » basée sur la fonction distance signée, mais pas pour la méthode de la

pseudo-concentration. D'une part, l'absence d'un traitement spécifique mène à une évaluation ponctuelle inconsistante de la viscosité et de la densité. D'autre part, le gradient de la pseudo-concentration construite sur de telles régularisations contient des changements de signes dans la direction qui sont conservés dans le calcul de la normale. L'application de l'opérateur de divergence pour obtenir de l'information sur la courbure devient désastreuse. Lorsque le degré de continuité p est fixé, il est inefficace d'utiliser un opérateur d'approximation I_h^k où $k > p$, puisque nous ne pourrions obtenir qu'une précision de l'ordre de $O(h^{p+\frac{1}{2}})$. Ainsi pour définir la pseudo-concentration, nous choisissons la régularisation $H_\epsilon^{0,6}$ pour son degré de continuité maximal permettant d'utiliser des interpolants de degré $k = 1$ à $k = 6$ tout en maintenant un taux de convergence $\|H_\epsilon^{0,6} - I_h^k H_\epsilon^{0,6}\|_2 = \mathcal{O}(h^{k+1})$.

Nous avons établi une méthodologie de calcul de la normale et de la courbure qui est robuste. Cette méthodologie est robuste car elle s'applique sur des fonctions éléments-finis de degré quelconque, continues ou discontinues. Les opérateurs de dérivations proposés sont robustes puisqu'ils fournissent un résultat numériquement bien posé. Les singularités des systèmes linéaires (locaux) à résoudre sont traités spectralement. Nous obtenons des opérateurs dont la précision possède des ordres de convergence en lien avec le degré d'approximation. Nous pouvons retenir que la reconstruction des dérivées par une approximation du développement de Taylor ($\bar{\nabla}$) est plus robuste que l'approche par projection locale au sens L^2 ($\tilde{\nabla}$). Ce dernier opérateur ne semble pas supporter l'augmentation du degré d'approximation k . L'opérateur $\bar{\nabla}_{N,q}$ est plus coûteux que l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ et n'offre pas une meilleure précision. Pour de bas degrés d'approximation ($k \leq 3$), l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ est plus précis que $\bar{\nabla}_{Z,t}$ et possède une précision dont l'ordre de convergence est meilleur. Cependant, pour $k > 3$ l'opérateur $\bar{\nabla}_{Z,t}$ est plus stable et possède des ordres de convergence en lien avec le degré d'approximation, quelque soit le degré d'approximation utilisé. Ces observations sont communes aux figures illustrant

les convergences des précisions du gradient, de la normale et de la courbure. En conclusion, pour de bas degrés d'approximation $k \leq 3$, nous choisissons de calculer les dérivées avec l'opérateur $\nabla_{N,t}$. Pour un degré d'approximation $k > 3$, nous utilisons l'opérateur $\nabla_{Z,t}$. Notons également que le maillage \mathcal{T}_δ adapté sur la fonction de Dirac n'améliore pas les ordres de convergence mais offre une stabilisation de la convergence sous le raffinement par rapport au maillage \mathcal{T}_H . C'est une illustration du fait que la métrique basée sur le hessien de la pseudo-concentration n'est pas un bon choix. Nous revenons sur ce point au chapitre suivant.

La méthodologie proposée pour calculer la courbure est simple. Elle se base sur l'exclusion de certaines projections locales en détectant les discontinuités de la norme de la normale. Cela permet de supprimer le bruit que nous aurions obtenu si nous avions appliqué l'opérateur de divergence sur ces discontinuités. Le calcul de la normale mène à une précision $\mathcal{O}(h^{k+1})$, et nous avons logiquement un calcul de la courbure dont la précision est $\mathcal{O}(h^k)$. Ces opérateurs sont coûteux en temps de calcul lorsque ceux-ci sont utilisés de façon très intensive. C'est pourquoi nous avons proposé une construction globale de ces opérateurs, permettant d'équilibrer le temps de calcul et la mémoire. Cependant, la mémoire requise peut devenir importante pour de gros maillages. Nous pouvons accélérer les temps de calcul, mais au prix d'un coût mémoire non négligeable. De plus, cette reconstruction globale ne peut pas s'appliquer au calcul de la courbure puisque pour calculer celle-ci nous excluons un ensemble de reconstructions locales qui ne sont pas invariantes dans le temps.

L'inconvénient de la méthodologie du calcul numérique de la force capillaire volumique est la résolution minimale du maillage requise dans la zone de transition

pour être en mesure de calculer la courbure

$$\kappa < \frac{1}{2h}.$$

C'est précisément l'inconvénient de la méthode de la pseudo-concentration. La résolution du maillage doit être suffisamment fine dans la région de transition pour que la définition de la variable eulérienne et les calculs basés sur celle-ci soient convenablement effectués :

$$h_n < \frac{\epsilon}{2},$$

où h_n est la taille des éléments dans la direction de la normale. L'adaptation de maillage que nous verrons au chapitre suivant est essentielle pour répondre à cette exigence.

Enfin, une perspective intéressante serait d'explorer des reconstructions locales des dérivées en utilisant des approximations de Padé au sens des moindres carrés. Les approximations de Padé sont des fractions rationnelles de polynômes. Elles possèdent l'avantage de posséder un rayon de convergence plus large que les approximations par développement de Taylor.

CHAPITRE 3

LA MISE-À-JOUR DE LA VARIABLE EULÉRIENNE

Résumé

Quelque soit la méthode numérique utilisée pour résoudre l'équation de transport (cf. équation (1.19)), on constate l'introduction inhérente de diffusion artificielle dont les techniques de stabilisation sont responsables (SUPG, GD), cette diffusion étant d'autant plus importante dans les régions de fortes courbures. Les conséquences de cette diffusion sont une dégradation de la modélisation de la physique à l'interface, i.e. une dégradation de l'évaluation des paramètres physiques tels que la viscosité et la densité :

$$\mu = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)F_h;$$

$$\rho = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)F_h,$$

ainsi qu'une dégradation de la qualité de la discrétisation de la force capillaire volumique (1.65) basée sur les dérivées de F et appliquée dans un voisinage de la surface libre,

$$\mathbf{f}_\Gamma^H = -\alpha \left(\nabla \cdot \frac{\nabla F_h}{\|\nabla F_h\|} \right) \nabla F_h.$$

Avec la résolution de l'équation de transport, la pseudo-concentration perd ses propriétés initiales (du temps t_0) et nous avons au mieux (pour $t > t_0$) :

$$0 \leq F_h(t) \leq F_h(t_0);$$

$$\|F_h(t)\| \leq \|F_h(t_0)\|;$$

$$\|\nabla F_h(t)\| \leq \|\nabla F_h(t_0)\|.$$

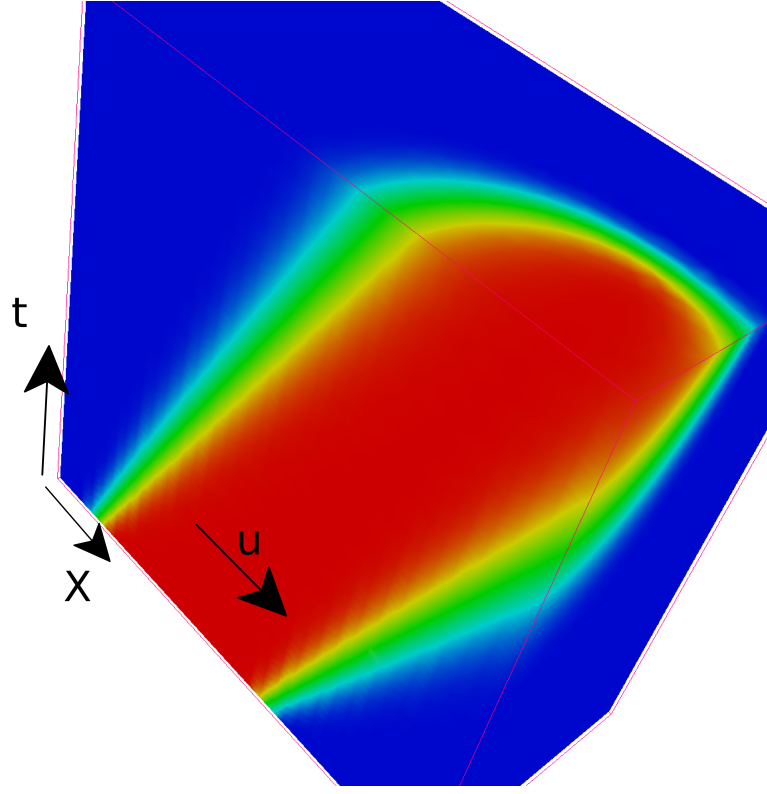


Figure 3.1: Illustration espace-temps de la diffusion de Ω_ϵ . La diffusion s'accompagne d'une dépendance en temps du paramètre $\epsilon(t)$.

La diffusion du gradient de la pseudo-concentration présente un inconvénient majeur. Nous avons une dilatation du domaine Ω_ϵ (cf. figure 1.12), c'est-à-dire qu'il existe des points $\mathbf{x} \in \Omega_\epsilon$ tels que $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma\| > \epsilon$ où \mathbf{x}_Γ est la projection orthogonale de \mathbf{x} sur Γ . Ceci est illustré à la figure 3.1. Nous avons une représentation du graphe espace-temps de la pseudo-concentration lorsque celle-ci est transportée dans un champ de vitesse $\mathbf{u} = (1, 0)$. La zone de transition Ω_ϵ correspond à la zone verte, le rouge correspond à la valeur 1 de la pseudo-concentration et le bleu correspond à la valeur nulle. En d'autres termes, nous avons

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} \geq 0,$$

et l'objectif de ce chapitre est de proposer une méthodologie qui fera que

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} \approx 0.$$

Supposons que la courbure κ est constante $\forall t > t_0$. La diffusion du gradient s'accompagne alors d'une dilution de l'intensité de la force capillaire volumique :

$$\|\mathbf{f}_\Gamma(t)\| < \|\mathbf{f}_\Gamma(t_0)\|.$$

Le modèle CSF n'est plus correctement appliqué et la pseudo-concentration doit être corrigée dans le but de supprimer la diffusion numérique excessive introduite lors de la résolution numérique de l'équation de transport. Beaucoup de travaux ont été réalisés pour résoudre ce problème lorsque la variable de marquage correspond à la fonction distance euclidienne signée à l'interface ϕ . Ces techniques sont principalement basées sur les travaux de Osher et Sethian (Osher et Sethian (1988)), où une équation non linéaire de nature hyperbolique doit être résolue afin de retrouver les propriétés géométriques de ϕ sans que la position de l'interface ne soit altérée :

$$\begin{cases} \frac{\partial d}{\partial t} &= \text{sign}(\phi)(1 - |\nabla d|); \\ d(\mathbf{x}, 0) &= \phi(x), \end{cases} \quad (3.1)$$

où

$$\text{sign}(\phi) = \begin{cases} -1 & \text{si } \phi < 0; \\ 0 & \text{si } \phi = 0; \\ 1 & \text{si } \phi > 0. \end{cases} \quad (3.2)$$

À noter que certains auteurs (Sussman et Smereka (1997), Sussman et Fatemi (2003), Fortin et Benmoussa (2006)) ajoutent à cette équation une contrainte sup-

plémentaire dans le but de conserver le volume du fluide :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} H_{\epsilon}^s(\phi) = 0.$$

Nous jugeons cette approche trop complexe. D'une part, il y a une équation supplémentaire à résoudre, et qui de plus est non linéaire. D'autre part, il y a une régularisation du signe (3.2) à définir convenablement ainsi que le choix approprié d'une méthode numérique (qui entraîne une diffusion supplémentaire) pour résoudre cette équation. Enfin, cette approche bénéficie de l'attention d'une large communauté. Nous avons plutôt choisi de privilégier une autre direction.

Pour réinitialiser la variable eulérienne, une autre approche, inspirée des méthodes de reconstruction pour les méthodes VOF (PLIC), consiste à calculer une discrétisation explicite et temporaire de la surface libre (Marchandise et Remacle (2006)). Cette discrétisation se base sur une localisation efficace de l'interface proposée par Remacle *et al.* (2007). La distance euclidienne d'un point à la surface libre discrète est calculée en utilisant l'algorithme « Approximate Nearest Neighbors », notamment disponible avec l'utilisation de la librairie ANN (Mount et Arya (1997)), qui permet de calculer à faible coût la distance euclidienne minimale entre un point et un grand ensemble de points. C'est une approche compétitive vis-à-vis de la résolution d'une équation supplémentaire, et nous l'avons choisie puisqu'elle permet d'obtenir un opérateur qui transforme la pseudo-concentration discrète en une approximation de la fonction distance signée correspondante. Notons que Marchandise et Remacle (2006) utilisent une représentation explicite particulière de l'interface et ne détaillent pas comment la fonction distance est signée. L'approche que nous proposons complète celle-ci avec une représentation continue par morceaux de l'interface basée sur ces points permettant le calcul d'une projection orthogonale précise. Comme pour les méthodes VOF, nous proposons une extension de la méthode

de la pseudo-concentration à laquelle nous associons la discrétisation explicite de l'interface. La méthodologie proposée se compose d'une représentation discontinue de la pseudo-concentration, avec un degré d'approximation quelconque, et d'une méthode de réinitialisation basée sur la discrétisation explicite de l'interface.

L'objectif de ce chapitre est d'explorer la précision de cette « généralisation », et de mettre en évidence ses forces et ses faiblesses. Nous nous concentrons sur deux aspects : conserver une région de transition uniforme et contrôlée, et conserver le volume des fluides.

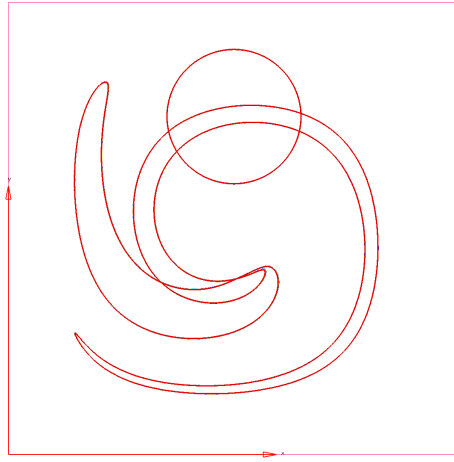
Les problèmes abordés dans ce chapitre

Les problèmes de vérification inclus dans ce chapitre se classent en deux catégories. Deux problèmes de référence sont inclus dans la première catégorie. Ces problèmes n'impliquent que l'équation de transport munie d'un champ de vitesse analytique. Nous utilisons la méthode de Galerkin discontinue pour effectuer la résolution numérique de cette équation. Le premier problème abordé, initialement introduit par Bell *et al.* (1989), est connu sous le nom de « vortex-in-a-box » (cf. figure 3.2(a)). Une fonction distance signée initiale est donnée par

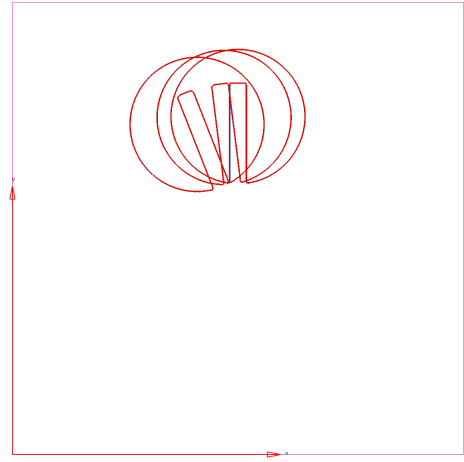
$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{8} - \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|, \quad (3.3)$$

avec $\mathbf{c} = (\frac{1}{2}, \frac{3}{4})$, et un champ de vitesse à divergence nulle est donné par

$$\mathbf{u}(x, y, t) = \begin{cases} u_x(x, y, t) = \sin(2\pi y) \sin^2(\pi x) \cos(\frac{\pi t}{8}); \\ u_y(x, y, t) = -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \cos(\frac{\pi t}{8}). \end{cases} \quad (3.4)$$



(a) Le problème du « vortex-in-a-box ».



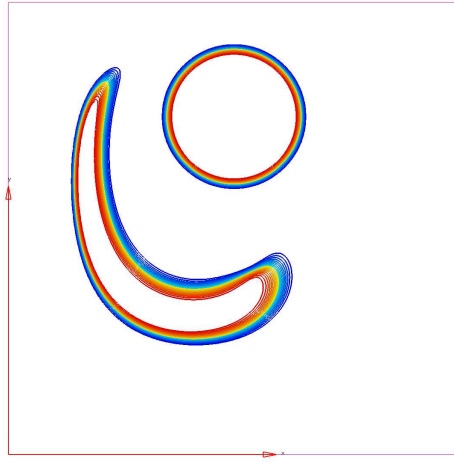
(b) Le problème du « disque de Zalesak ».

Figure 3.2: Illustration des deux problèmes de référence pour vérifier la conservation de la quantité de volume : (a) interfaces du problème du « vortex-in-a-box » aux temps $t_0 = 0$, $t_1 = 0,6$ et $t_2 = 1,875$, (b) interfaces du problème du « disque de Zalesak » aux temps $t_0 = 0$, $t_1 = 12,5$ et $t_2 = 37,5$.

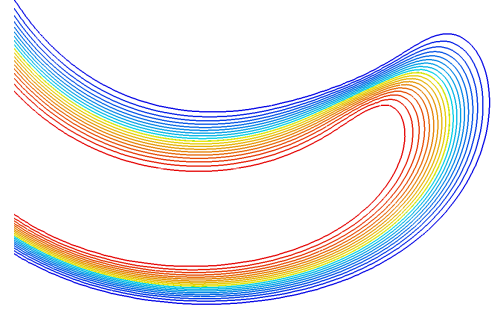
La période de temps est choisie comme $[t_0, t_f] = [0, 8]$, afin que $F(t_0) = F(t_f)$. L'intérêt de ce problème est de vérifier la capacité de notre méthodologie à traiter l'évolution d'un fluide sous la forme d'un long filament. La proximité de l'axe médian avec la zone de transition nous force à choisir un paramètre ϵ suffisamment petit. À titre d'illustration, la figure 3.3 illustre la diffusion de la région de transition avec $F_h(t = 0) = I_h^4 H_{\epsilon = \frac{5}{100}}^{0,6}(\phi)$ et $\mathbf{u}_h(t) = I_h^4 \mathbf{u}(t)$. Nous avons utilisé un maillage structuré de taille $h = \frac{1}{64}$ et un schéma d'Euler implicite avec un pas de temps constant $\Delta_t = 0,0025$.

Le second problème est un problème classique connu sous le nom de « disque de Zalesak » (cf. figure 3.2(b)). La surface libre initiale, au temps $t_0 = 0$, est un disque muni d'une encoche. Pour ce problème, le champ de vitesse s'exprime sous la forme :

$$\mathbf{u}(x, y) = \begin{cases} u_x(x, y) = \frac{\pi}{314}(\frac{1}{2} - y); \\ u_y(x, y) = \frac{\pi}{314}(x - \frac{1}{2}). \end{cases} \quad (3.5)$$



(a) Illustration de la région de transition



(b) Agrandissement de la figure 3.3(a)

Figure 3.3: Illustration de la diffusion du gradient pour le problème « vortex-in-box » aux temps $t_0 = 0$ et $t_1 = 0,6$. Le diamètre local de la zone de transition n'est plus uniforme le long de l'interface.

Tableau 3.1: Paramètres de configuration du problème de la bulle oscillante

Ω	$[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2$	ϵ	$\frac{2}{10}$
ρ_1	1000	ρ_2	10
μ_1	$\frac{1}{2}$	μ_2	$\frac{1}{2}$
r_x	$\frac{1}{5}$	r_y	$\frac{\sqrt{2}}{10}$
L	0.2	U	0.1
Re	40	We	0.4

Les paramètres utilisés pour obtenir les résultats illustrés à la figure 3.2(b) sont $F_h(t = 0) = I_h^4 H_{\epsilon=\frac{5}{100}}^{0,6}(\phi)$, $\mathbf{u}_h(t) = I_h^1 \mathbf{u}(t)$, un maillage structuré de taille $h = \frac{1}{64}$, un schéma d'Euler implicite et un pas de temps constant $\Delta_t = 0,05$. L'intérêt de ce problème est de vérifier la conservation des zones de fortes courbures. En effet,

pour ce problème l'interface est rigide et présente des discontinuités du premier ordre (représentées par les coins) qui doivent être conservées le plus exactement possible lorsque celle-ci est transportée.

Pour ce qui est de la deuxième catégorie de problèmes que nous abordons, nous choisissons deux problèmes d'écoulements à surface libre. Pour tester la conservation de la quantité de matière sur un problème à surface libre incluant la modélisation de la tension superficielle, nous nous basons sur le problème référencé dans Grooss et Hesthaven (2006). Le phénomène à simuler est celui d'une bulle oscillante qui n'est pas soumise à la gravité. Les paramètres du problème sont résumés au tableau 3.1, où r_x et r_y désignent les longueurs des demi-axes (alignés sur les axes cartésiens) de l'ellipse représentant l'interface au temps initial. Ce problème constitue une première étape simple pour vérifier la conservation de la quantité de matière. Le phénomène à simuler ne comprend pas de changement de topologie. L'intérêt de ce problème réside dans le fait que la dynamique de la surface libre est uniquement déterminée par la force capillaire. Une seconde étape de vérification est effectuée à l'aide de la simulation d'un phénomène de la coalescence d'une bulle, soumise à la poussée d'Archimède, avec une surface libre horizontale (Sussman et Smereka (1997)). Les fluides en présence sont l'air et l'eau, chacun occupant la moitié du volume disponible sur le domaine considéré. La gravité est incluse. Au temps initial, une bulle d'air au repos est immergée et l'objet de la simulation est l'étude de la dynamique du changement de topologie de la surface libre associée à l'éclatement de la bulle. Ce problème nous permet de confronter l'algorithme de réinitialisation de la pseudo-concentration sur un changement de topologie.

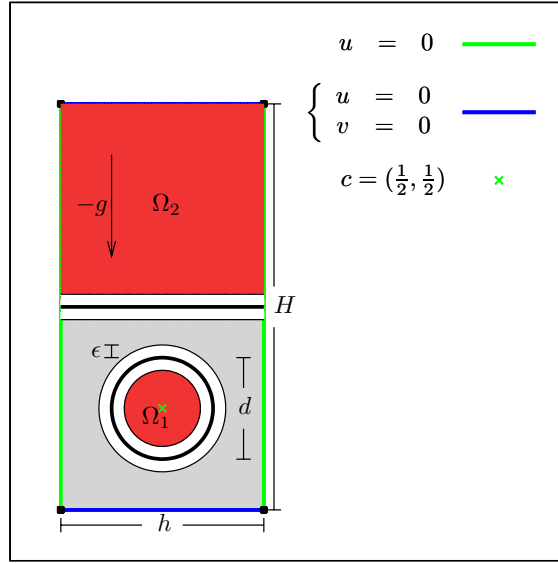


Figure 3.4: Configuration initiale du problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède

3.1 La discrétisation explicite de la surface libre

Avec la variable eulérienne discrétisée, nous avons sur chaque élément une représentation implicite discrète de l'interface représentée par l'isosurface d'une fonction polynomiale. Cette représentation implicite discrète ne bénéficie pas de condition de continuité sur les arêtes. Elle est au mieux continue sur celles-ci seulement si la variable eulérienne appartient à $V_h^k(\Omega)$. Lorsque la pseudo-concentration appartient à $W_h^k(\Omega)$ et que l'on désire reconstruire une interface continue sur les arêtes, alors un pré-traitement doit être appliqué dans le but de recouvrir la continuité.

Définition 3.1 On note Γ_h^k l'isosurface discrète de la pseudo-concentration discrète qui vérifie l'équation

$$(I_h^k H_\epsilon)(\Gamma_h^k) = \frac{1}{2}.$$

Numériquement, la surface libre est implicitement définie par Γ_h^k .

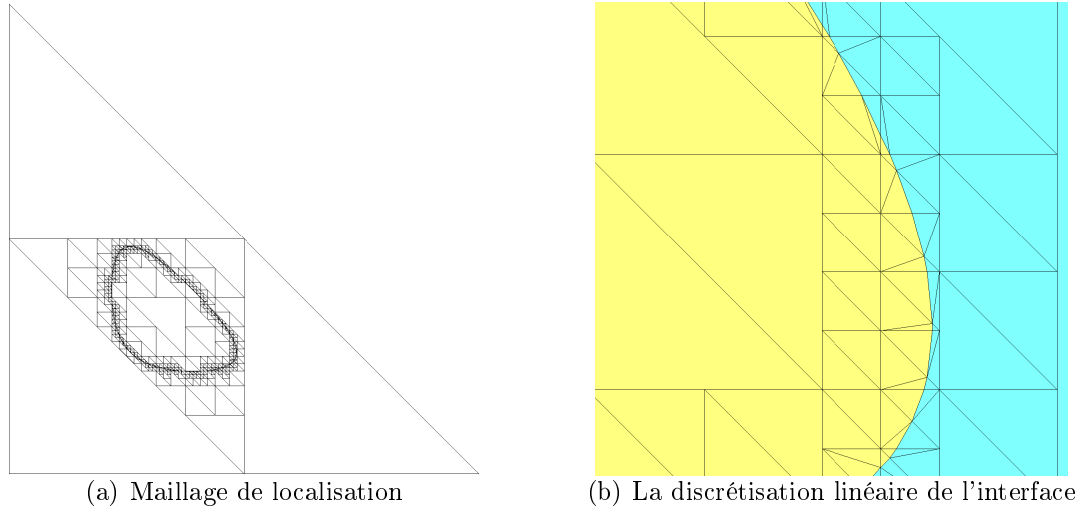


Figure 3.5: Localisation et discrétisation linéaire de l'isosurface $\frac{1}{2}$ d'une fonction de base de Lagrange de degré 4.

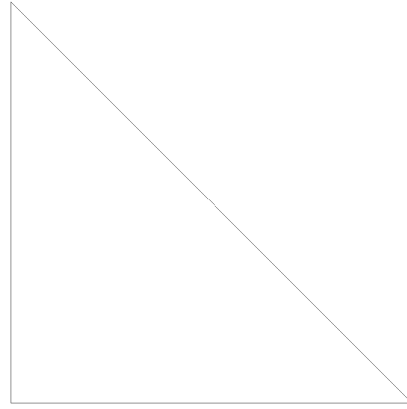
Notre objectif est d'approximer les courbes Γ_h^k avec une reconstruction paramétrique et de calculer la fonction distance signée $\phi_{\Gamma_h^k}$ correspondante.

3.1.1 La localisation de la surface libre

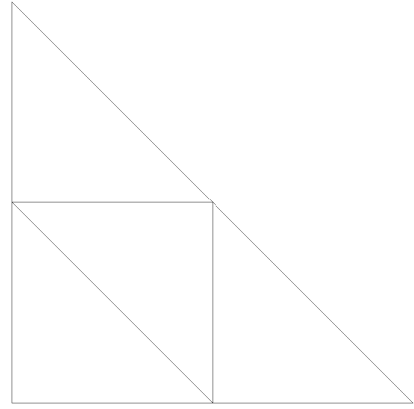
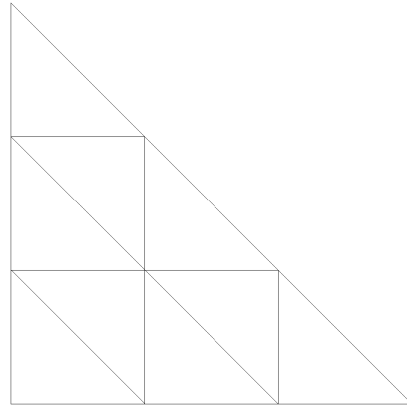
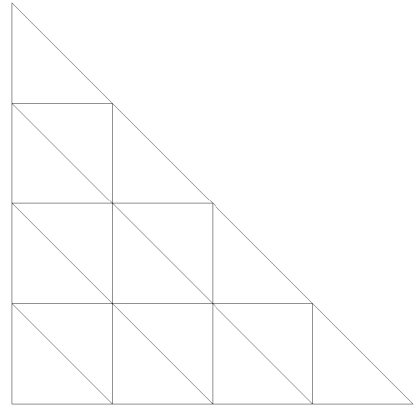
La localisation de la surface libre s'effectue élément par élément. Pour le cas linéaire, trouver deux degrés de liberté $z_i, z_j \in \Sigma_K^1$ tels que

$$\left(F_h(z_i) - \frac{1}{2}\right) \left(F_h(z_j) - \frac{1}{2}\right) < 0,$$

suffit pour détecter la présence de la surface libre. On obtient ainsi un encadrement de la courbe discrète Γ_h^1 dont la précision est égale au diamètre de l'élément. Cette procédure est simple mais n'est plus valable pour $k > 1$. L'algorithme de localisation proposé par Remacle *et al.* (2007) répond à ce problème en utilisant une subdivision locale de l'élément de référence en 4^ℓ sous-éléments linéaires permettant ainsi une approximation précise de Γ_h^k par $\Gamma_{\frac{h}{2^\ell}}^1$. Ce procédé revient à diviser les longueurs



(a) Éléments de référence

(b) ordre $k = 2$ (c) ordre $k = 3$ (d) ordre $k = 4$ Figure 3.6: Les subdivisions (de niveau $\ell = 0$) associées aux treillis d'ordre k

des arêtes par 2^ℓ , ce qui est équivalent à multiplier la métrique par 4^ℓ . Notons que l'orientation et le quotient anisotrope r_M sont invariants sous l'opération de subdivision qui utilise le maillage issu du treillis d'ordre 2 de l'élément de référence Σ_K^2 . Les figures 3.5(a) et 3.5(b) illustrent le maillage de la localisation et la discrétisation de l'isosurface de valeur $\frac{1}{2}$ d'une des fonctions de base de Lagrange de degré 4. Cet algorithme est généralisable grâce à l'introduction des treillis d'ordre k comme règle de subdivision. En effet, pour des interpolants quadratiques nous

avons la relation $I_{\frac{h}{2}}^1 I_h^{k=2} f = I_{\frac{h}{2}}^1 f$, qui n'est cependant plus vérifiée pour $\ell > 1$ ou pour $k > 2$. Cette généralisation nous permet d'écrire $I_{\frac{h}{k}}^1 I_h^k f = I_{\frac{h}{k}}^1 f$, $\forall k > 1$. Les subdivisions correspondant aux treillis d'ordre k sont illustrées à la figure 3.6.

Remarque 3.1 *La localisation proposée est basée sur une information nodale de la variable eulérienne. Dans le cas où nous sommes en possession d'une représentation modale $\pi_h^k H_\epsilon$ de la pseudo-concentration, alors l'élément K est contenu dans la région de transition si*

$$\left\| F_h - \frac{\int_K F_h}{\int_K dK} \right\|_{L^2} = \sum_{i=2}^{\frac{(k+1)(k+2)}{2}} \bar{f}_i^2 > 0.$$

Toujours pour le cas linéaire ($k = 1$), Claisse *et al.* (2009) proposent une borne de l'erreur d'approximation de l'interface avec la proposition suivante :

Proposition 3.1 *Si le maillage \mathcal{T} est unité dans la métrique*

$$\mathbf{M} = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \frac{1}{\eta^2} & 0 \\ 0 & \frac{|\kappa_\Gamma|}{\eta} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T, \quad (3.6)$$

où \mathbf{V} est la matrice représentative du repère de Fresnet $(\mathbf{n}_\Gamma, \mathbf{t}_\Gamma)$, alors

$$\|\Gamma - \Gamma_h^1(\phi)\|_{K,\infty} < \eta \left(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right) + \eta^2 \kappa_1, \quad (3.7)$$

où κ_1 et κ_2 sont le maximum et le minimum local de la courbure.

Remarque 3.2 *Notons que le quotient anisotrope r_M tel que défini par l'équation (1.73) s'exprime ici par*

$$r_M = \sqrt{\max |\kappa| \eta},$$

et si on pose $\eta = \epsilon$ alors nous avons

$$\max \kappa < \frac{1}{\epsilon} \iff r_M < 1.$$

En s'appuyant sur le fait que $\Sigma_h^k = \Sigma_{\frac{h}{k}}^1$, nous obtenons l'estimateur d'erreur

$$\left\| \Gamma - \Gamma_{\frac{h}{k}}^1 \right\|_{K,\infty} < \frac{\eta(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2}) + \eta^2 \kappa_1}{k}. \quad (3.8)$$

Pour traiter les variables discrétisées avec des interpolants de degré k , on se base sur une approximation linéaire de la variable eulérienne définie sur un élément K :

$$\begin{aligned} S_h^{k,\ell} : V_h^k(K) &\longrightarrow V_{\frac{h}{k^\ell}}^1(K) \\ f_h &\longmapsto S_h^{k,\ell}(f_h) = I_{\frac{h}{k^\ell}}^1 f_h. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Le nombre de sous-éléments correspondant au niveau ℓ est $n = k^\ell$ et l'aire des sous-éléments $K_i \subset K$ est donnée par $|K_i| = \frac{|K|}{n}$. Ainsi la paramétrisation explicite de la surface libre présentée à la section suivante s'appuie sur une représentation linéaire de la variable eulérienne.

Une information importante est à mentionner. Nous considérons qu'une discrétisation linéaire est suffisante dans le sens où les estimateurs d'erreurs d'interpolation sur lesquels nous nous basons pour adapter le maillage sont des estimateurs d'interpolation linéaire. Ces estimateurs ne sont bien entendu pas optimaux pour des interpolants de degré > 1 . Le maillage est donc adapté de telle sorte qu'une représentation linéaire de la variable eulérienne doit demeurer précise.

Remarque 3.3 *Notre méthodologie n'est valable que pour des problèmes bifluïdes dans le sens où on ne peut pas traiter les triples contacts. On peut noter que*

les triples contacts appartiennent aux axes médians définis par la surface libre, et ne sont pas exactement représentables par la ligne de niveau d'une seule fonction « lisse » ; et le maillage devrait nécessairement coïncider avec ces points. La perspective d'une modélisation impliquant plus de deux fluides doit ainsi s'accompagner de la définition de plusieurs variables eulériennes. Pour n fluides il faut au minimum considérer $n - 1$ variables eulériennes pour représenter correctement les interfaces.

3.1.2 La paramétrisation de l'interface

Avec la définition de l'opérateur (3.9), l'opération de la discrétisation explicite de l'interface revient à approximer la surface libre par un ensemble de segments

$$\mathbf{e}_i(s) = \mathbf{P}_i(1 - s) + \mathbf{P}_{i+1}s,$$

tels que

$$S_h^{k,\ell}(f_h)(\mathbf{e}_i(s)) = \frac{1}{2}, \quad \forall s \in [0, 1]. \quad (3.10)$$

La construction explicite de l'interface est résumée par l'algorithme 2. Le but est de construire un maillage de l'interface que nous notons Γ_h^1 pour le reste du développement.

Si la variable eulérienne F_h considérée est discontinue par élément (i.e. $F_h \in W_h^k$), alors nous obtenons une interface continue sur les triangles et discontinue sur les arêtes, à moins qu'un procédé visant à recouvrir la continuité soit préalablement appliqué. Avec cette approche, nous sommes confrontés à la pauvreté de la régularité de la paramétrisation obtenue. D'une part, la courbure basée sur la paramétrisation est nulle presque partout, mais la fonction distance à une paramétrisation de

Algorithme 2 Construction explicite de l'interface

ENTRÉES: La variable eulérienne $F_h(\mathcal{T}_h)$
SORTIES: Le maillage de l'interface Γ_h^1

```

pour tout  $K \in \mathcal{T}_h$  faire
  · Évaluer  $(F_h)(\Sigma_{\frac{h}{k^\ell}}^1(K))$ ,
  pour tout  $\bar{K} \in \Sigma_{\frac{h}{k^\ell}}^1(K)$  faire
    · Déterminer le segment orienté  $e_i$  (cf. équation (3.10))
  fin pour
fin pour
pour tout  $e_i$  faire
  · Déterminer les segments adjacents  $e_j$  au segment  $e_i$ 
fin pour
  · Construire une base de données du maillage  $\Gamma_h^1$  (calcul des graphes et détermination du nombre d'entités, du nombre de courbes fermées, du nombre de courbes ouvertes)
  
```

classe \mathcal{C}^0 possède des axes médians pour chacun des sommets $P_i \in \Gamma_h^1$. Ces axes médians sont des discontinuités présentes dans la direction de la normale à Γ_h^1 , et la conséquence néfaste survient lorsque la divergence d'un tel champ de vecteur est calculée pour obtenir une information sur la courbure.

Pour contourner ce problème, nous utilisons la discrétisation linéaire Γ_h^1 comme polygone de contrôle d'une fonction B-Spline cubique. La courbe linéaire est ainsi transformée en une courbe « approximante », notée $\bar{\Gamma}_h$, et qui possède l'avantage d'être continue à l'ordre 2.

Définition 3.2 *On définit la régularisation $\bar{\Gamma}_h^1$ d'une courbe linéaire par morceaux Γ_h^1 comme la fonction B-spline cubique définie par le polygone de contrôle Γ_h^1 . Un segment $e_i \in \Gamma_h$ est ainsi transformé, en fonction de ses deux segments voisins, en une courbe qui a pour expression :*

$$C : \mathcal{C}^0 \longrightarrow \mathcal{C}^2$$

$$\mathbf{e}_i \longmapsto C(\mathbf{e}_i) = \bar{\mathbf{e}}_i, \quad (3.11)$$

où la courbe $\bar{\mathbf{e}}_i(s)$ est définie pour $s \in [0, 1]$ et s'exprime sous la forme

$$\bar{\mathbf{e}}_i(s) = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & s & s^2 & s^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ 3 & -6 & 3 & 0 \\ -1 & 3 & -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{i-1} \\ \mathbf{P}_i \\ \mathbf{P}_{i+1} \\ \mathbf{P}_{i+2} \end{pmatrix}.$$

Remarque 3.4 La courbe régularisée $\bar{\Gamma}_h^1$ est contenue dans l'enveloppe convexe de Γ_h^1 . Une méthode de subdivision interpolante, i.e. une interpolation exacte des points \mathbf{P}_{i+1} à l'aide d'une spline cubique, ne possède pas la propriété d'être contenue dans l'enveloppe convexe du polygone de contrôle et peut conduire de ce fait à des aberrations topologiques. De plus, la propriété d'invariance géométrique d'une spline cubique dépend de la méthode de construction.

La méthode de subdivision de Catmull-Clark (Catmull et Clark (1978)) est un procédé récursif pour construire une approximation linéaire par morceaux qui converge uniformément vers $\bar{\mathbf{e}}_i$. À titre d'illustration, nous considérons une courbe linéaire par morceaux composée de 4 segments formant un carré tel qu'illustré à la figure 3.7. La courbe C_1 est la courbe subdivisée au premier niveau en partant de la courbe initiale C_0 et la courbe limite est notée C_∞ .

À partir de trois points consécutifs $(\mathbf{P}_0, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2)$, le schéma discret de subdivision est donné par :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P}_1^{n+1} \\ \mathbf{P}_0^{n+1} \\ \mathbf{P}_2^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_1^n \\ \mathbf{P}_0^n \\ \mathbf{P}_2^n \end{pmatrix} = \mathbf{B} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_1^n \\ \mathbf{P}_0^n \\ \mathbf{P}_2^n \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

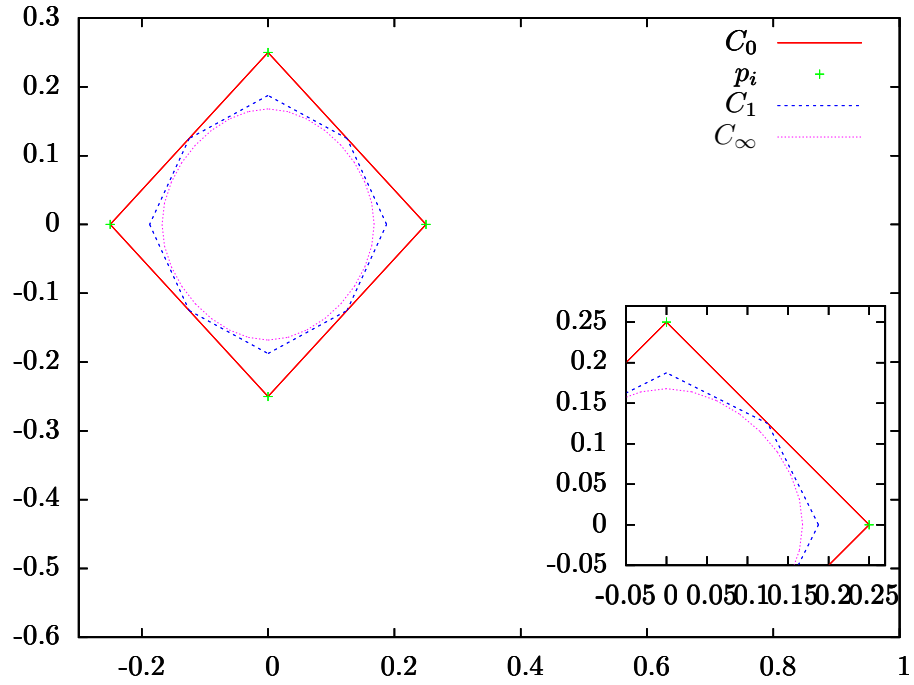


FIG. 3.7: Paramétrisation de l'interface à l'aide d'une B-spline en se basant sur un polygone de contrôle formé par un carré.

Le point limite \mathbf{b}_∞ peut se calculer à l'aide d'une décomposition en valeurs propres qui s'exprime sous la forme

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \frac{1}{2} & \\ & & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \end{pmatrix},$$

et le passage à la limite nous permet d'écrire

$$\mathbf{B}^\infty = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}.$$

Ainsi le point \mathbf{P}_1^∞ a pour expression

$$\mathbf{P}_1^\infty = \frac{1}{6}\mathbf{P}_0 + \frac{2}{3}\mathbf{P}_1 + \frac{1}{6}\mathbf{P}_2. \quad (3.13)$$

Il est également possible d'évaluer la tangente limite \mathbf{t}_1^∞ . Le premier vecteur propre à droite nous donne la pondération des points pour obtenir la position du point limite \mathbf{b}_∞ . Le deuxième vecteur propre à droite nous donne la pondération des points pour obtenir le vecteur tangent au point \mathbf{t}_∞ de la courbe qui s'exprime alors sous la forme

$$\mathbf{t}_1^\infty = \frac{1}{2}(\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_0). \quad (3.14)$$

La figure 3.8 contient les points limites et les tangentes associées qui déterminent complètement la courbe limite.

Si on considère les trois premiers points \mathbf{P}_0 , \mathbf{P}_1 et \mathbf{P}_2 , et si nous appliquons le schéma de subdivision, alors le point limite est donné par $\frac{1}{6}(\mathbf{P}_0 + 4\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2)$ ce qui correspond à

$$\mathbf{S}(0) = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ 3 & -6 & 3 & 0 \\ -1 & 3 & -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_0 \\ \mathbf{P}_1 \\ \mathbf{P}_2 \\ \mathbf{P}_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}(\mathbf{P}_0 + 4\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2).$$

et de façon similaire,

$$\mathbf{S}(1) = \frac{1}{6}(\mathbf{P}_1 + 4\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3).$$

À la première étape de subdivision, le point $\mathbf{Q} = \frac{\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_1}{2}$ est inséré, et le point

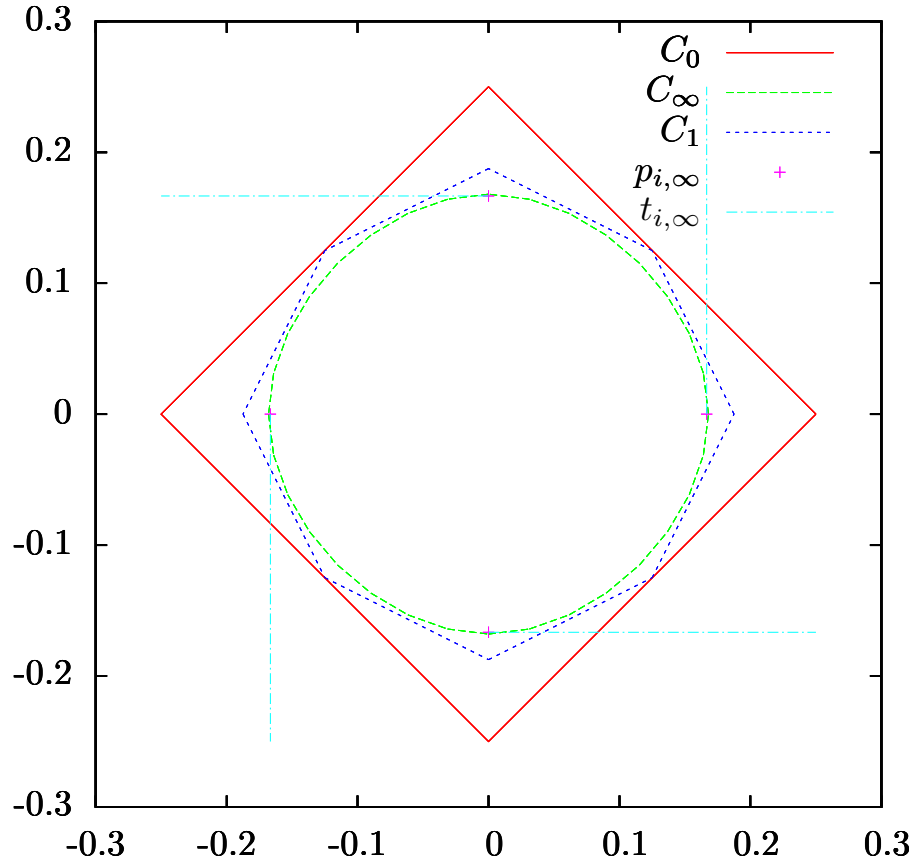


FIG. 3.8: Calcul des points limites et des tangentes associées de Γ_h^2

limite de \mathbf{Q} est précisément

$$\begin{aligned} & \frac{1}{6} \left(\frac{1}{8} (\mathbf{P}_0 + 6\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2) \right) + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{8} (\mathbf{P}_1 + 6\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3) \right) + \frac{2}{3} \left(\frac{\mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_1}{2} \right) \\ &= \mathbf{P}_0 \frac{1}{48} + \mathbf{P}_3 \frac{1}{48} + \mathbf{P}_1 \frac{23}{48} + \mathbf{P}_2 \frac{23}{48} = \mathbf{P} \left(\frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

On a donc $\mathbf{S}(0) = \mathbf{P}_1^\infty$ et $\mathbf{S}(1) = \mathbf{P}_2^\infty$ et après chaque étape de subdivision, chaque point inséré Q_i est tel qu'il existe k qui satisfait $S(\frac{1}{2^k}) = Q_i^\infty$. De plus, $\mathbf{S}'(0) = \frac{\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_0}{2}$ et $\mathbf{S}'(1) = \frac{\mathbf{P}_3 - \mathbf{P}_1}{2}$ ce qui donne précisément la pondération indiquée par le deuxième vecteur propre à droite de la décomposition. Si on applique

le changement de variable

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P}_1^\infty \\ \mathbf{P}_2^\infty \\ \frac{\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_0}{2} \\ \frac{\mathbf{P}_3 - \mathbf{P}_1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_0 \\ \mathbf{P}_1 \\ \mathbf{P}_2 \\ \mathbf{P}_3 \end{pmatrix},$$

alors

$$\frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ 3 & -6 & 3 & 0 \\ -1 & 3 & -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 3 & -2 & -1 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

de telle sorte que

$$\bar{\mathbf{e}}(s) = \begin{pmatrix} 1 & s & s^2 & s^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 3 & -2 & -1 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P}_1^\infty \\ \mathbf{P}_2^\infty \\ \frac{\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_0}{2} \\ \frac{\mathbf{P}_3 - \mathbf{P}_1}{2} \end{pmatrix}.$$

Cette dernière matrice représente précisément la base polynomiale de Bernstein de degré 3.

Par exemple, la figure 3.9 illustre l'isosurface de valeur nulle de la fonction $I_h^2 \left(\frac{13}{10} - \|\mathbf{x} - (-1, \frac{1}{2})\| \right)$ sur l'élément de référence \hat{K} . On remarquera que les normales et les tangentes affichées ne coïncident pas avec les sommets de la triangulation puisque celles-ci sont issues d'une transformation B-splinaire.

La régularisation du maillage Γ_h^1 est simple, celle-ci est résumée par l'algorithme 3.

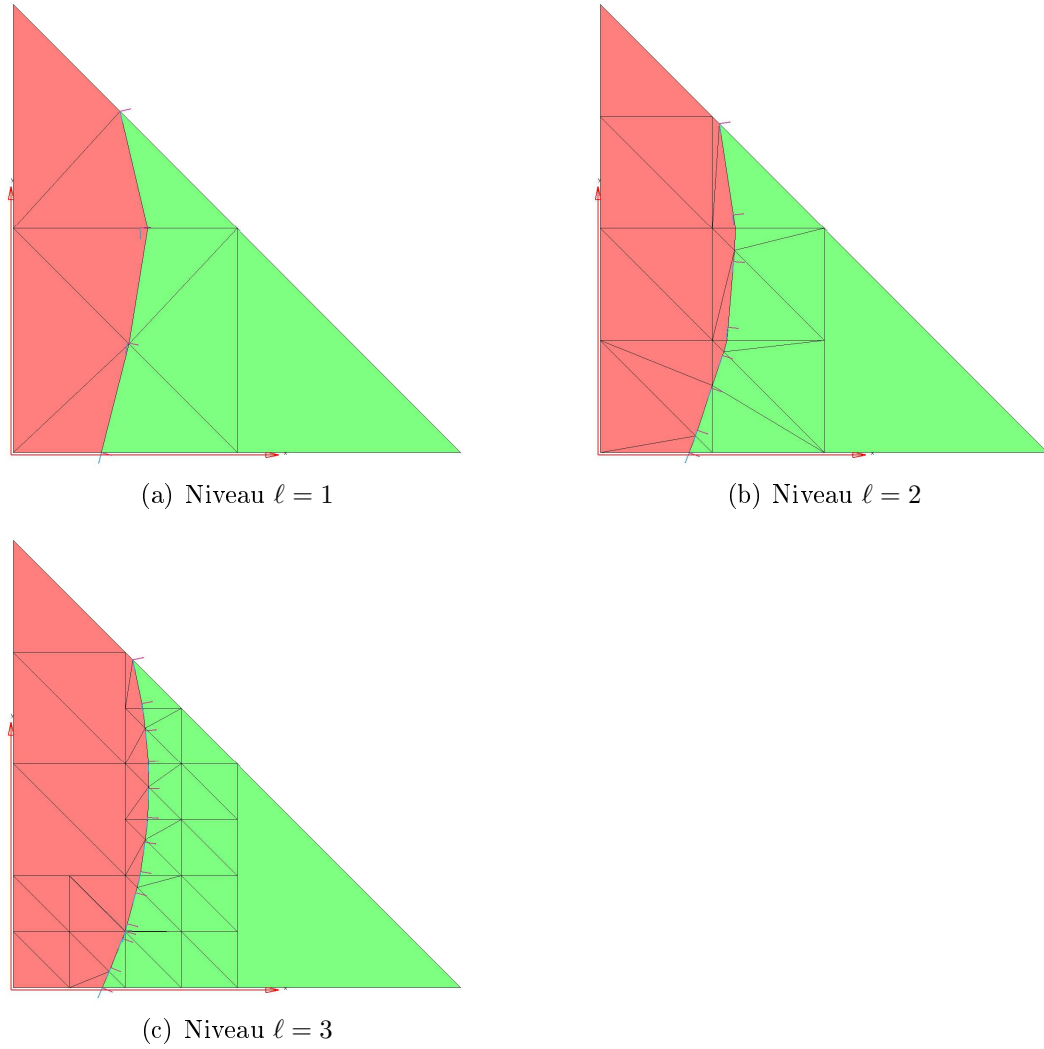


FIG. 3.9: Coloration des fluides à l'aide de la discrétisation linéaire. Les normales calculées de la spline cubique sont aussi affichées.

3.1.3 Le calcul de la distance signée à la surface libre paramétrée

L'objectif de cette section est de proposer un calcul efficace de la fonction distance signée à une courbe discrète. Pour atteindre cet objectif, nous devons calculer la projection orthogonale et le signe permettant d'identifier les fluides.

La détermination du signe est assurée par la représentation de la courbe discrète.

Algorithme 3 Régularisation de l'interface sur un élément

ENTRÉES: Le maillage de l'interface Γ_h^1 calculé avec l'algorithme 2

SORTIES: Le maillage régularisé de l'interface $\bar{\Gamma}_h^1$

pour tout $\mathbf{x} \in \Gamma_h$ **faire**

 si \mathbf{x} appartient à deux arêtes **alors**

 · Calculer la nouvelle position $\bar{\mathbf{x}}$ à l'aide de l'équation (3.13)

 · Calculer la tangente de la courbe en $\bar{\mathbf{x}}$ à l'aide de l'équation (3.14)

 fin si
fin pour

Chacun des segments $\mathbf{e}_i \in \Gamma_h^1$ est orienté de façon à ce que le fluide principalement représenté par la pseudo-concentration soit à gauche de celui-ci. Le fluide principalement représenté est le fluide caractérisé par $H(\phi) > \frac{1}{2}$.

La projection orthogonale d'un point sur un segment ne pose pas de difficulté. Pour une paramétrisation régularisée, la projection orthogonale d'un point P sur la courbe $\bar{\mathbf{e}}(s)$ (cf. figure 3.10) vérifie

$$\bar{\mathbf{e}}'(s) \cdot (\bar{\mathbf{e}}(s) - P) = 0.$$

Avec une initialisation de s_0 suffisamment précise, la méthode de Newton nous permet d'écrire

$$s_{n+1} = s_n - \frac{\bar{\mathbf{e}}'(s) \cdot (\bar{\mathbf{e}}(s) - P)}{\bar{\mathbf{e}}''(s) \cdot (\bar{\mathbf{e}}(s) - P) + \bar{\mathbf{e}}'(s) \cdot \bar{\mathbf{e}}'(s)}.$$

La principale difficulté est de déterminer une approximation initiale s_0 suffisamment précise. L'utilisation de la librairie ANN permet de résoudre partiellement ce problème en utilisant préalablement une sous-discrétisation linéaire de la paramétrisation cubique. L'approche « Approximate Nearest Neighbors » permet de déterminer efficacement le point le plus proche, nous avons alors le segment de la

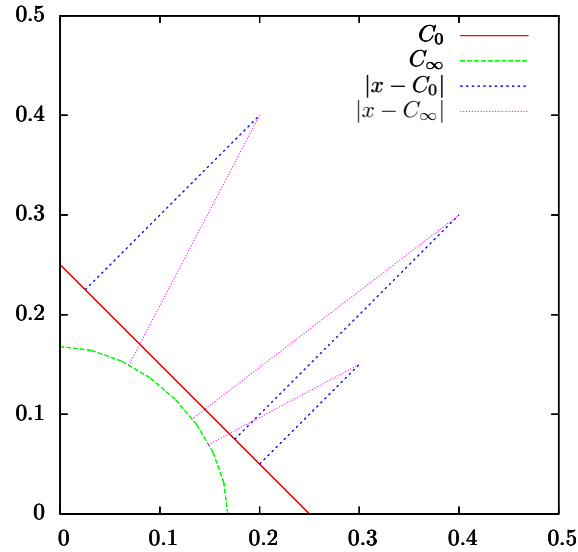


Figure 3.10: Projection orthogonale de 3 points sur la courbe $\bar{\Gamma}_h$

courbe contenant ce point ainsi qu'une approximation initiale s_0 . Cette approche n'est pas suffisante car on peut facilement construire un exemple où pour $\mathbf{x} \in \Omega$ et $\bar{\mathbf{x}} \in \Gamma_h$, le point le plus proche de \mathbf{x} , nous avons $\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}$ qui intersecte Γ_h . Une autre solution partielle est de sélectionner les n points les plus proches correspondant à au plus n segments sur lesquels nous effectuons une projection orthogonale. Cette approche ne résoud pas le problème, mais diminue la probabilité qu'il survienne. En prenant l'exemple du « disque de Zalesak », nous effectuons une discrétisation explicite de l'interface sur une discrétisation de la fonction distance signée $I_h^3\phi$. La figure 3.11(a) illustre l'interface représentée implicitement par $S^{0,3}(I_h^3\phi)$, où pour des besoins de visualisation nous représentons $S^{3,3}(I_h^3\phi)$. La figure 3.11(b) illustre le résultat obtenu avec la régularisation proposée $\bar{S}^{3,3}(I_h^3\phi)$. La figure 3.12 est un agrandissement des deux figures sur les zones de fortes courbures. Il est clair qu'il n'est pas possible de discrétiser exactement les coins sauf si ceux-ci sont inclus dans l'ensemble des sommets du maillage. Ces coins sont donc tronqués sur une longueur égale au diamètre de l'élément.

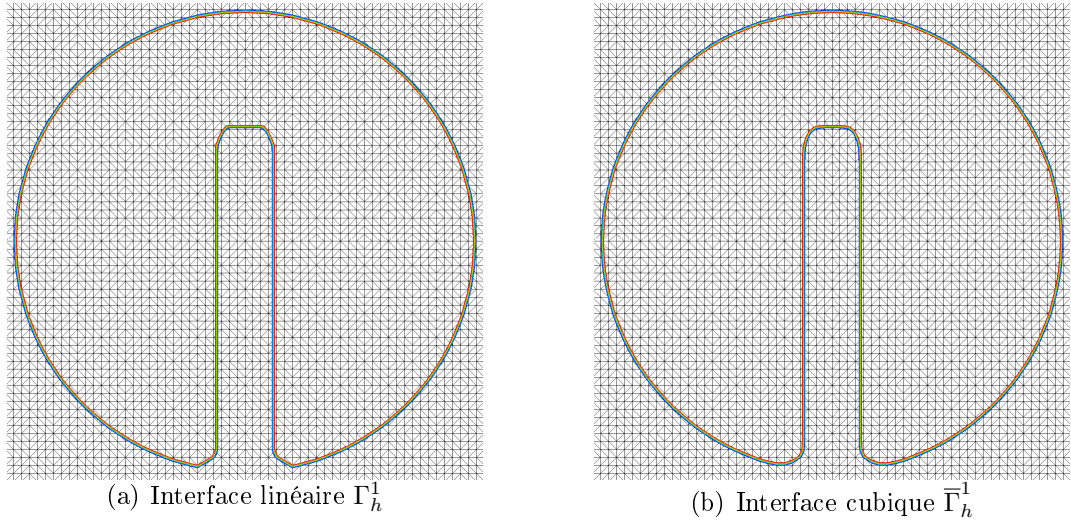


Figure 3.11: Discretisation sur le problème du « disque de Zalesak »

La régularisation proposée remplit son rôle puisque nous obtenons une discrétisation explicite dont la normale et la courbure sont continues. Cependant, nous n'illustrons pas la piètre qualité de la courbure obtenue par l'évaluation de l'expression suivante :

$$\kappa_{\Gamma_h^1} = \frac{1}{\|\bar{\mathbf{e}}'\|^3} \bar{\mathbf{e}}' \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \bar{\mathbf{e}}'.$$

Notre expérience nous a permis de savoir que l'information sur la courbure à partir d'un calcul explicite (et simple) dépendant de la paramétrisation cubique n'est pas exploitable. Nous nous orientons naturellement vers l'utilisation des opérateurs de reconstruction abordé au chapitre précédent pour calculer la normale et la courbure, en se basant sur l'approximation de la distance à l'interface explicite au lieu de s'appuyer sur la pseudo-concentration.

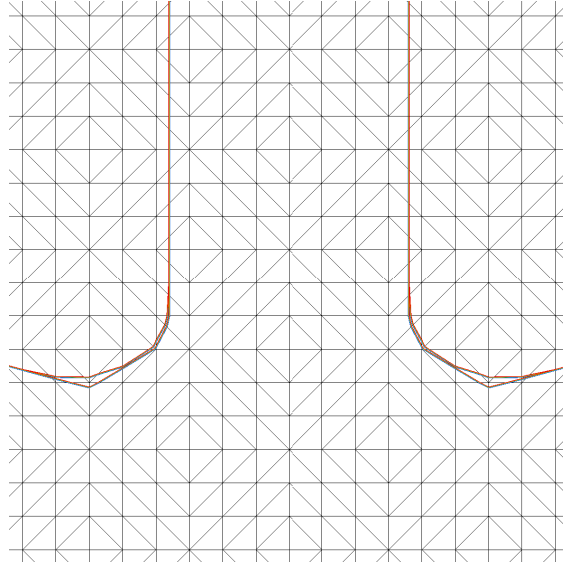


Figure 3.12: Comparaison entre la paramétrisation linéaire et la paramétrisation de Γ_h^2 pour le problème du « disque de Zalesak »

3.2 L'application à la réinitialisation de la pseudo-concentration

La réinitialisation de la pseudo-concentration se base sur le calcul de la fonction distance signée à l'interface discrète introduite à la section précédente :

$$\overline{F}_h = I_h^k H_\epsilon(\phi_{\Gamma_h^1(F_h)}).$$

Plusieurs questions surviennent naturellement. Quelle est la qualité de l'approximation de la fonction distance $\phi_{\Gamma_h}(F_h)$? Quelle est la qualité de la redéfinition de la pseudo-concentration $H_\epsilon(\phi_{\Gamma_h}(f_h))$? Nous nous concentrons sur deux aspects : la conservation du gradient dans la direction normale à l'interface, i.e. une distribution uniforme des isosurfaces contenues dans la région de transition ; et la conservation du volume délimité par la surface libre, ou la quantité de volume du fluide principal. Enfin, nous nous demandons s'il est vraiment nécessaire de réinitialiser la pseudo-concentration ?

Il est important de discuter de l'évaluation ponctuelle de la pseudo-concentration. Pour un instant $t > t_0$, la courbe Γ_h^1 calculée est une approximation de la courbe obtenue avec la solution analytique de l'équation différentielle. Numériquement, une méthode peut être conservative tout en ayant une petite fluctuation périodique de la quantité de matière. Il n'y a donc aucun sens de s'attendre à obtenir une grande précision de cette courbe à un instant t donné. Il faut plutôt considérer cette courbe comme un indicateur du voisinage de la surface libre. Il est évident que la surface libre doit demeurer invariante à travers le processus de réinitialisation de la pseudo-concentration. La méthode de régularisation de la surface libre que nous avons proposée transforme la représentation linéaire en une représentation cubique par morceaux « approximante ». La surface libre se déplace mais d'assez peu, comme nous pouvons le constater à la figure 3.12. Une perspective intéressante serait de calculer la fluctuation de la quantité de matière associée à la régularisation d'une courbe fermée :

$$\left| \int_{\Gamma_h^1} y'(t)x(t)dt \right| - \left| \int_{\bar{\Gamma}_h} \bar{y}'(t)\bar{x}(t)dt \right|,$$

où $(x(t), y(t))$ et $(\bar{x}(t), \bar{y}(t))$ sont les représentations paramétriques des courbes Γ_h^1 et $\bar{\Gamma}_h^1$.

Le volume délimité par la surface libre se calcule par l'expression

$$V = \sum_{K \in \mathcal{T}} \int_K F_h dK.$$

Cette expression peut s'évaluer de différentes façons. Notons que pour $F_h \in W_h^k$, avec une représentation modale, nous avons

$$V = \sum_{K \in \mathcal{T}} \sqrt{2}|K| \bar{f}_1^K. \quad (3.15)$$

Remarque 3.5 *Dans les simulations numériques qui suivent, nous avons effectué les calculs avec une relation « erronée » :*

$$V = \sum_{K \in \mathcal{T}} \sqrt{2}|K| \sum_{i=1}^{n_k} \bar{f}_i^K. \quad (3.16)$$

En effet, la décomposition dans la base orthonormale mène à la relation $\int_K F_h dK = \sqrt{2}|K|\bar{f}_1$. On peut cependant noter que

$$V - \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{K \in \mathcal{T}} \bar{f}_1^K = \sum_{K \in \mathcal{T}} \sqrt{2}|K| \sum_{i=2}^{n_k} \bar{f}_i^K.$$

L'erreur que nous avons commise est uniquement localisée dans la zone de transition de la pseudo-concentration puisqu'en dehors de cette zone, F_h est constante et l'erreur s'annule car $\bar{f}_i = 0$ pour $i \geq 2$. On s'aperçoit dans les simulations numériques qui suivent que cette erreur est contrôlée. Cela signifie que la projection L^2 de la solution F_h sur l'espace des fonctions constantes $W_h^0(\mathcal{T})$ est une approximation du volume du fluide dont l'erreur $F_h - P_h^0(F_h)$ est petite.

La figure 3.13 propose une illustration de la réinitialisation de la pseudo-concentration où nous voyons clairement que nous contrôlons la zone de transition le long de l'interface pour le problème « vortex-in-box ». Mentionnons que nous nous sommes ici limités à $k = 2$ pour discrétiser la pseudo-concentration et le champ de vitesse. Les autres paramètres sont identiques à ceux introduits en début de chapitre. La figure 3.14 compare la distribution des isovaleurs de la pseudo-concentration pour une réinitialisation basée soit sur $\bar{\Gamma}_h^1$ qui correspond à la paramétrisation B-splinaire proposée, soit sur Γ_h^1 qui correspond à la paramétrisation linéaire.

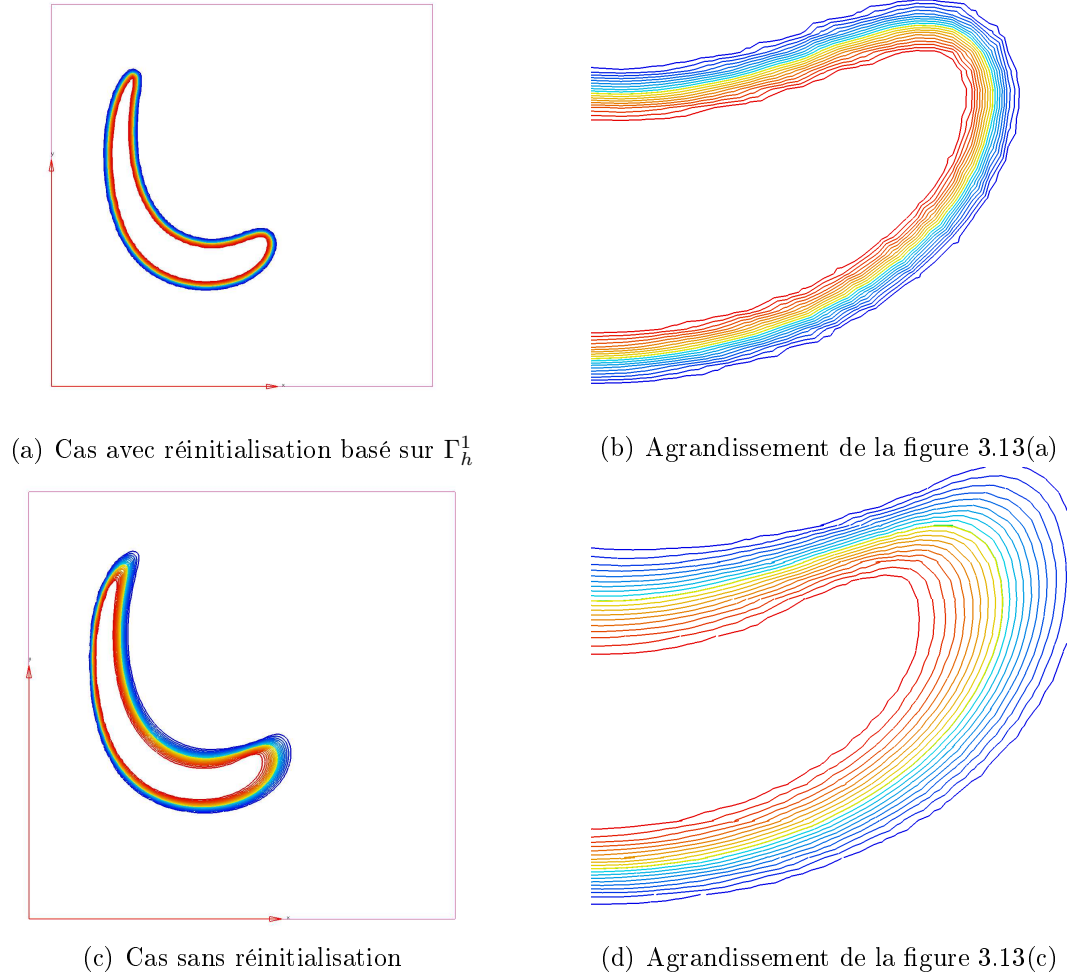


Figure 3.13: Effet de la réinitialisation sur la distribution des isovalues de la pseudo-concentration pour le problème du « vortex-in-box » au temps $t = 0,6$.

3.2.1 L'impact de la réinitialisation sur la conservation de la quantité de matière

Quelle est la qualité de l'approximation de la fonction distance $\phi_{\Gamma_h}(F_h)$? On se base sur un simple test pour illustrer la convergence de $\phi_{\Gamma_h}(F_h)$ sur la fonction distance signée analytique ϕ . Nous reprenons la configuration utilisée au chapitre précédent

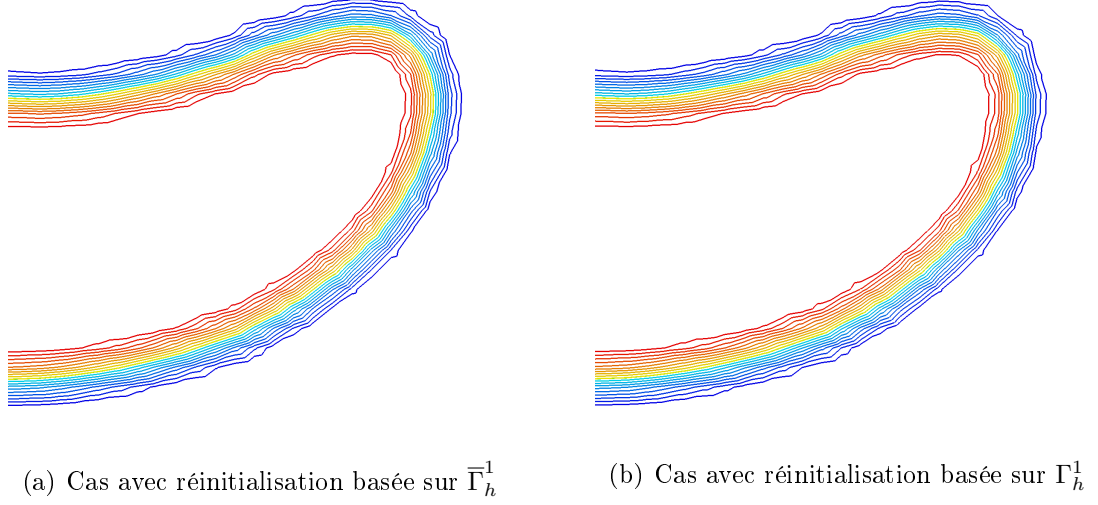


Figure 3.14: Comparaison de la distribution des isovalues de la pseudo-concentration pour une réinitialisation avec et sans paramétrisation B-splinaire pour le problème « vortex-in-box ».

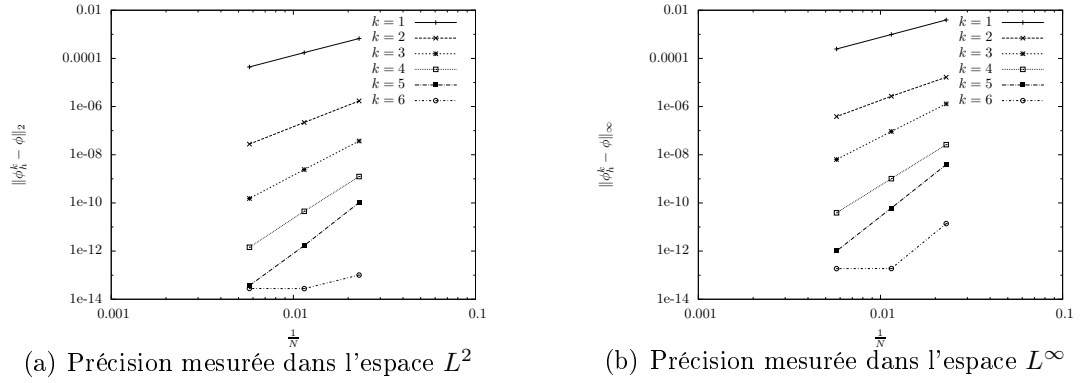


Figure 3.15: La convergence de l'approximation de la fonction distance signée $I_h^k \phi_\Gamma - \phi_\Gamma$ pour le problème \mathcal{P} .

pour réaliser les tests de convergence sur le calcul de la normale et de la courbure d'une surface libre représentée par un cercle de rayon $r = 10$ et de centre $(\frac{1}{2} - r, \frac{1}{2})$. Le maillage utilisé est \mathcal{T}_δ (cf. chapitre 2), et correspond à un maillage adapté pour la régularisation de la fonction de Dirac. Ce problème est noté \mathcal{P} . Les figures 3.15(a) et 3.15(b) représentent les normes L^2 et L^∞ de l'erreur $\phi_h - \phi$. Nous voyons clairement que les ratios de convergence sont en accord avec le degré de l'approximation. Nous

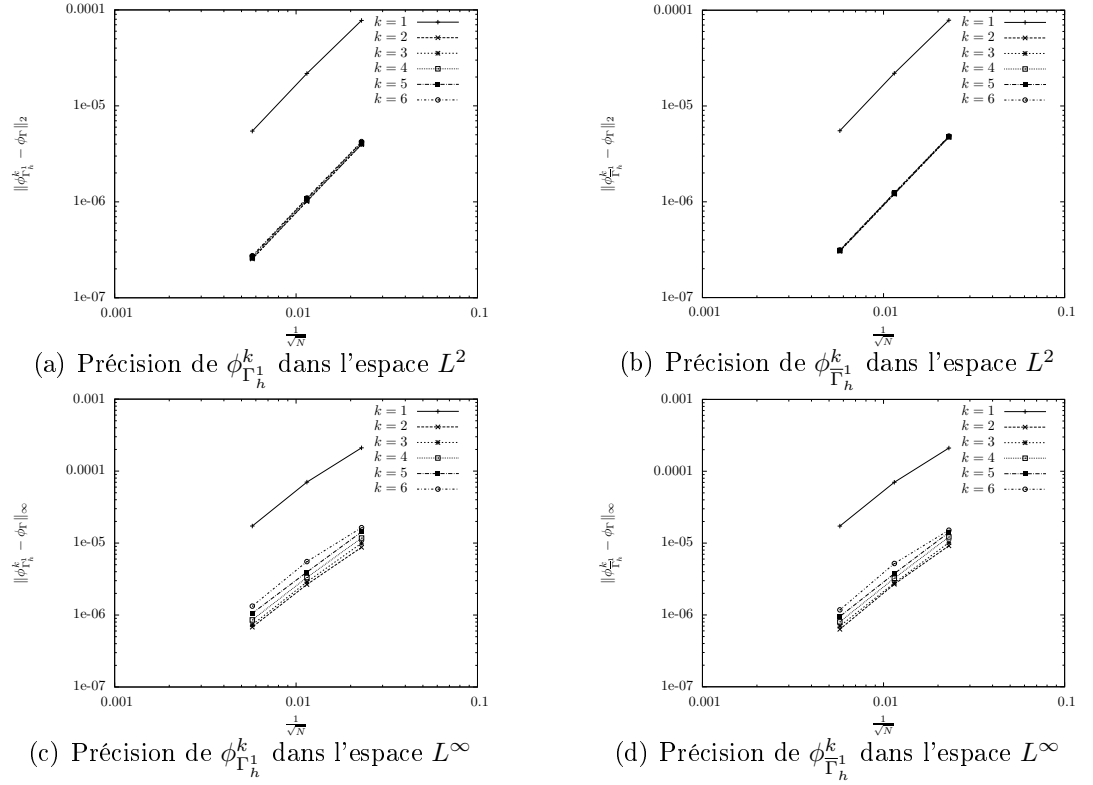


Figure 3.16: Erreur d'approximation des distances signées $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\phi_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P} .

effectuons maintenant le même calcul d'erreur mais en remplaçant ϕ_h par $\phi_{\Gamma_h^1}(F_h)$, puis par $\phi_{\bar{\Gamma}_h^1}(F_h)$. Les figures 3.16(a) et 3.16(c) illustrent les normes L^2 et L^∞ de l'erreur pour la discrétisation linéaire de l'interface, et les figures 3.16(b) et 3.16(d) illustrent les mêmes quantités pour la discrétisation cubique de la surface libre. Nous remarquons ici clairement que le taux de convergence ne dépend pas du degré d'approximation k . Le taux de convergence obtenu est quadratique et l'utilisation d'un interpolant de degré $k > 2$ détériore la précision de la reconstruction obtenue. Ce simple exemple ne nous permet pas d'être optimiste sur la validité de notre méthodologie pour des interpolants de degré quelconque.

Nous considérons un deuxième exemple permettant d'apprécier l'impact de la ré-initialisation sur la conservation du volume du fluide. On utilise une méthode de

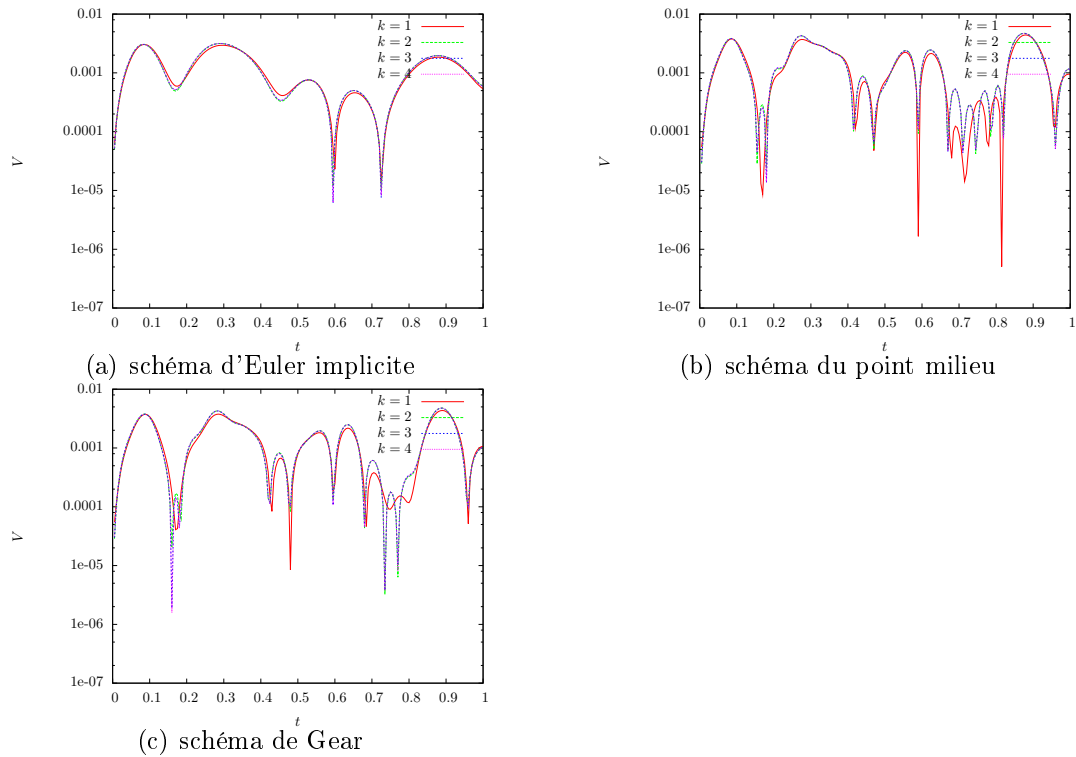


Figure 3.17: Erreur relative sur le calcul du volume du fluide pour le problème d'advection selon $u = (1, 0)$. Aucune réinitialisation n'est appliquée.

Galerkin discontinue pour résoudre l'équation

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x}$$

sur le domaine $\Omega = [0, 1]^2$, munie d'une condition de périodicité selon l'axe des x . On se donne une surface libre initiale comme étant un cercle de rayon r dont l'abscisse du centre est égale à $\frac{1}{2}$. Nous choisissons le domaine temporel de résolution $[t_0 = 0, t_f = 1]$, où nous avons au temps final

$$F(t_f) = F(t_0).$$

Notre objectif est d'effectuer une mesure de l'erreur relative sur le calcul de l'aire

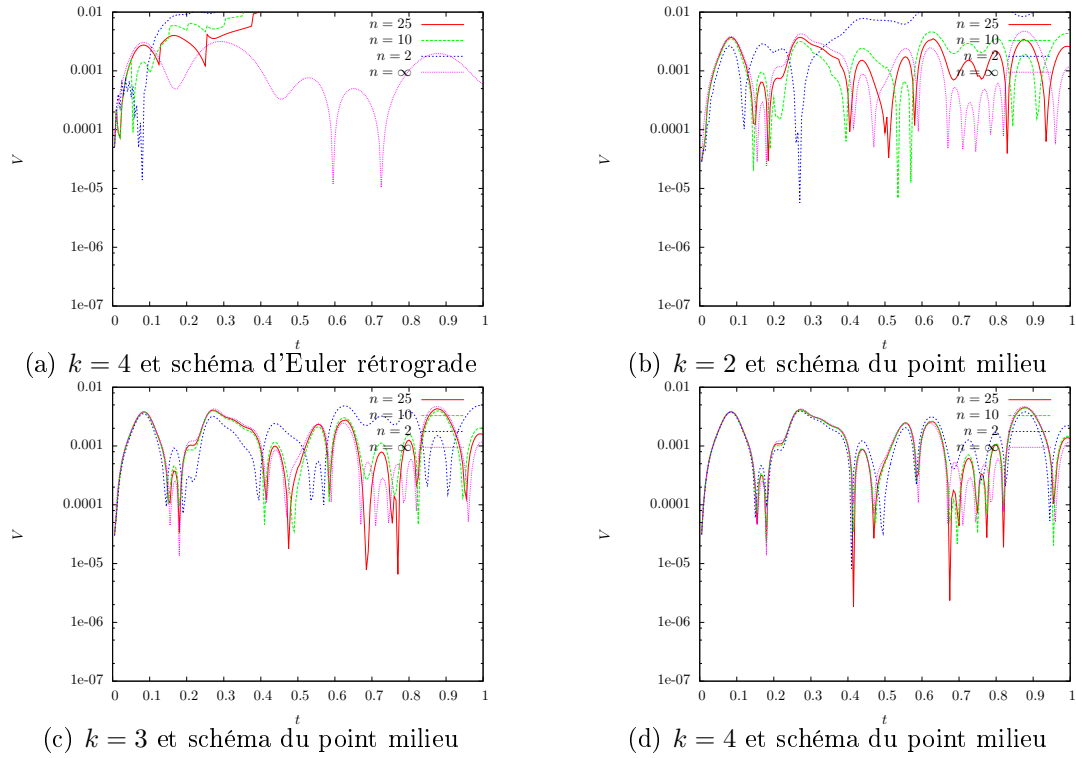


Figure 3.18: Erreur relative sur le calcul du volume du fluide pour le problème d'advection selon $u = (1, 0)$. n correspond à une réinitialisation tous les n pas de temps.

délimitée par la surface libre. Il est évident que la finesse de la discrétisation temporelle joue en faveur de la conservation du volume du fluide. L'ordre de précision du schéma de discrétisation en temps est également important. La méthode d'Euler rétrograde est connue pour être linéaire. Le schéma de Gear et le schéma du point milieu sont quant à eux d'ordre 2. On espère donc une meilleure conservation du volume à l'aide de ces schémas. La figure 3.17 illustre la conservation du volume du fluide lorsqu'aucune réinitialisation n'est appliquée pour différents schémas de discrétisation en temps. La figure 3.18 illustre l'impact de la réinitialisation sur le volume du fluide. Il apparaît clairement que réinitialiser trop souvent la pseudo-concentration mène à une mauvaise conservation du volume, surtout si l'approximation n'est pas assez riche (cf. figures 3.18(b), 3.18(c) et 3.18(d))

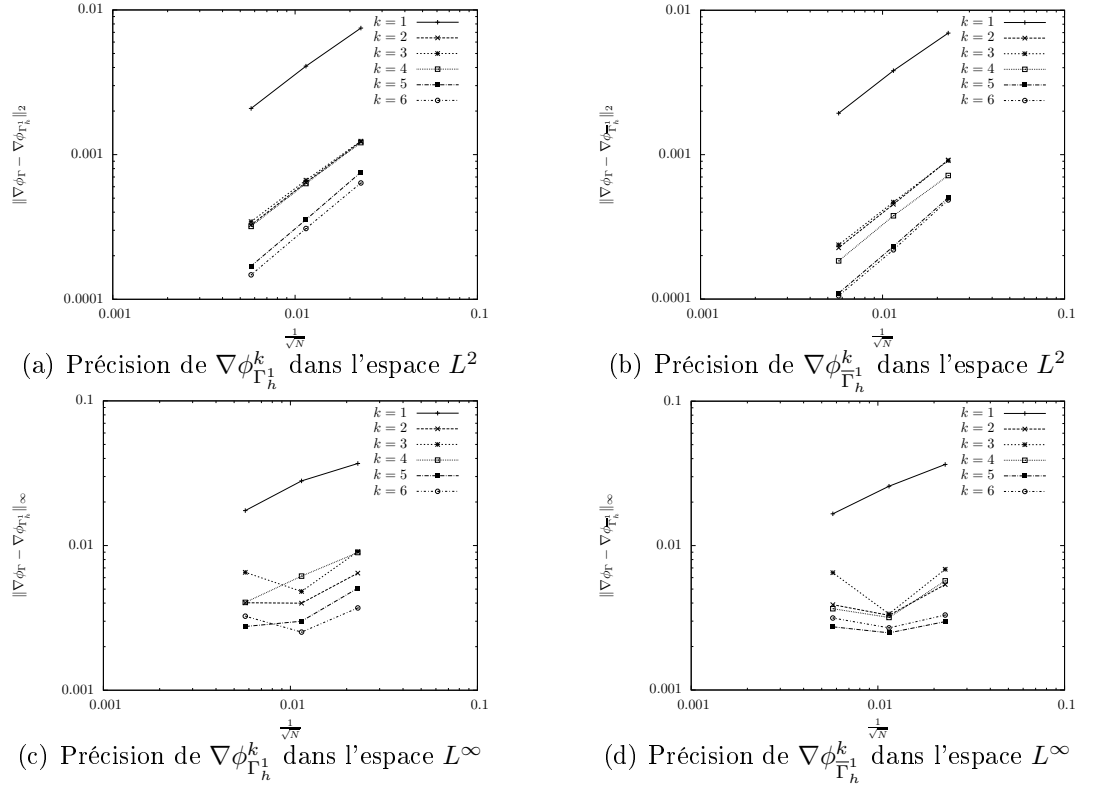


Figure 3.19: Convergence des gradients $\nabla\phi_\Gamma$ et $\nabla\phi_{\bar{\Gamma}}$ pour le problème \mathcal{P} .

3.3 Reconstruction de la normale et de la courbure

Cette section propose de calculer la normale et la courbure de la surface libre en se basant sur la fonction distance signée à l'interface discrète à l'aide de la méthodologie présentée au chapitre 2. Nous choisissons d'utiliser l'opérateur $\bar{\nabla}_{N,t}$ pour calculer les reconstructions des dérivées. La convergence du gradient est illustrée à la figure 3.19. On remarque une augmentation de la précision selon le degré d'approximation seulement pour la norme L^2 , cependant on voit que le ratio de convergence est indépendant du degré d'approximation. La convergence de la précision mesurée en norme L^∞ ne bénéficie pas de la même régularité. On peut noter que la régularisation cubique proposée (cf. $\bar{\Gamma}_h^1$) améliore uniquement la précision mais n'a aucun impact sur l'ordre de convergence. La convergence de la normale

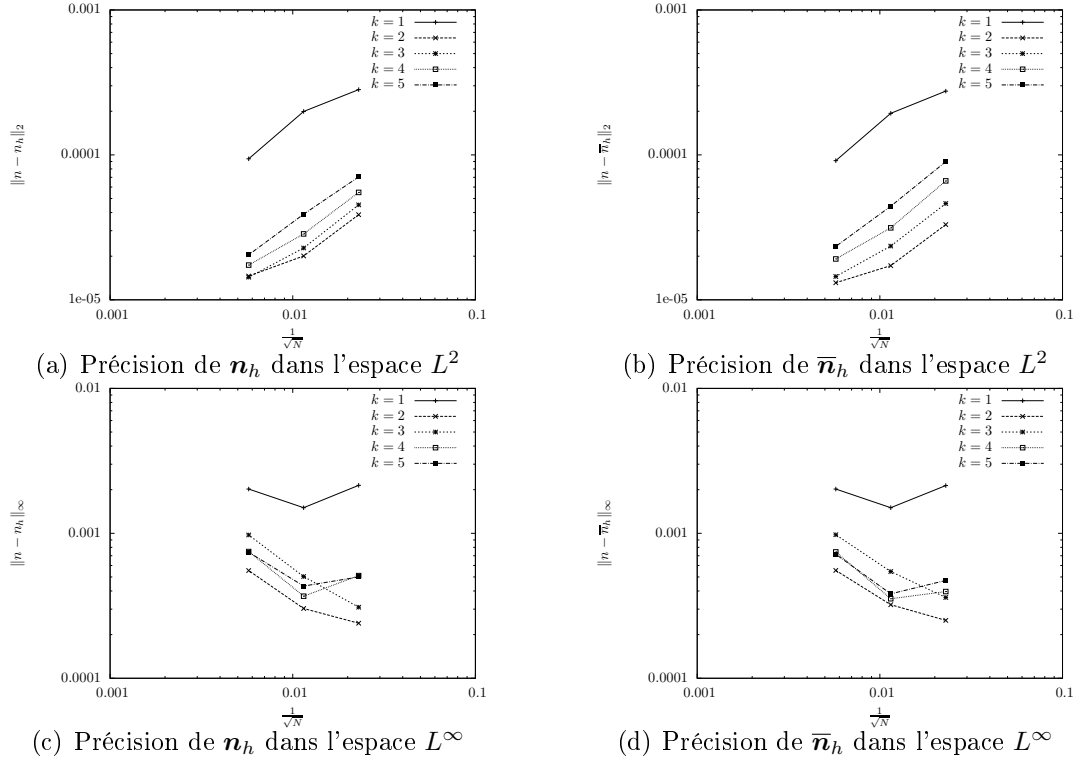


Figure 3.20: Convergence de la précision de la normale calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h}^1$ et $\phi_{\Gamma_h}^{-1}$ pour le problème \mathcal{P} .

est illustrée à la figure 3.20. La précision de l'approximation mesurée en norme L^∞ ne converge pas, et la précision n'augmente pas avec le degré d'approximation. Ces observations sont aussi valides pour la figure 3.21 qui illustre la convergence de la précision sur le calcul de la courbure. Les ordres de convergence se limitent à 2 quelque soit le degré d'approximation utilisé. Ceci est en accord avec la nature de la paramétrisation régularisée puisque celle-ci est seulement continue à l'ordre 2. Cependant, notre expérience a montré que les calculs de reconstruction de la courbure de la surface libre basés sur la fonction distance euclidienne signée obtenue souffre de bruits indésirables pour donner une bonne discrétisation de la courbure impliquée dans le calcul de la force capillaire volumique. La résolution de l'équation (3.1) semble donc également nécessaire, mais il faut noter que pour

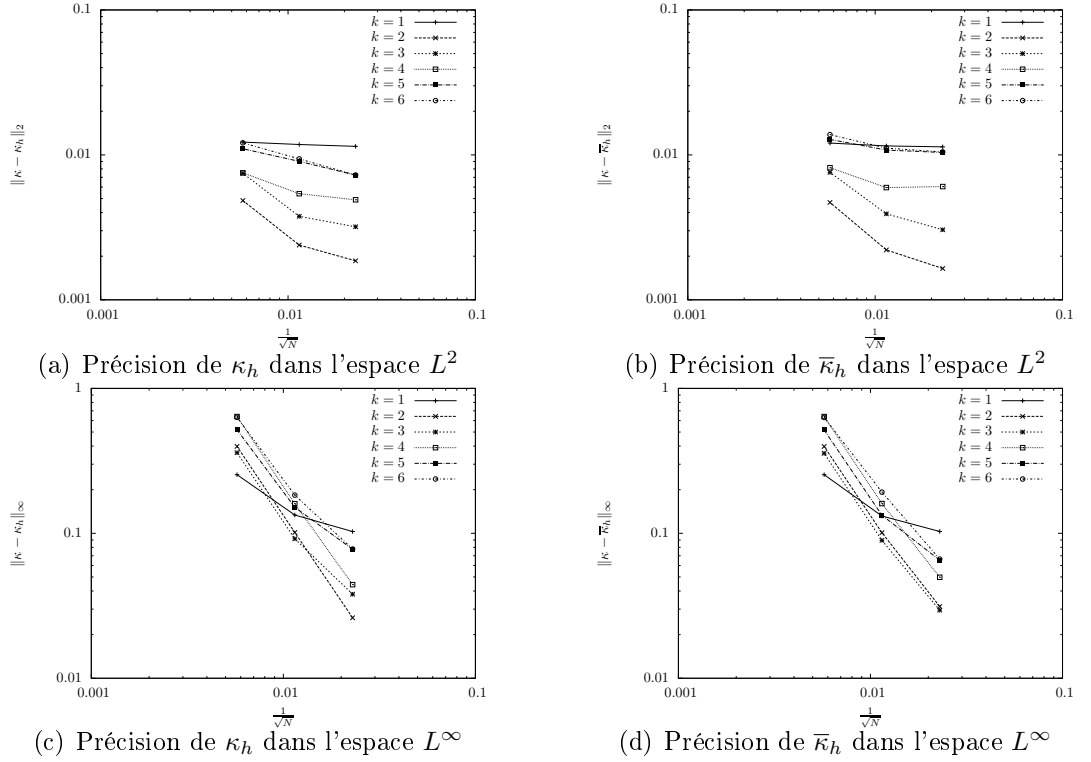


Figure 3.21: Convergence de la précision de $\|\kappa - \kappa_h\|$ pour la courbure calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\phi_{\bar{\Gamma}_h^1}$ pour le problème \mathcal{P} .

un maillage donné et fixe, peu de méthodes semblent complètement satisfaisantes. C'est pourquoi coupler les méthodes de réinitialisation avec les techniques d'adaptation de maillage s'avère être une bonne stratégie, approche qui a notamment été suggérée et approfondie par Claisse *et al.* (2009) et Claisse et Frey (2008) dans le cadre des maillages anisotropes. Comment expliquer un tel comportement ? La configuration du problème \mathcal{P} inclut une surface libre qui est en contact avec la frontière du domaine. Dans nos expériences, les reconstructions des dérivées sur le bord du maillage n'ont pas fait l'objet d'un traitement particulier. La régularité de la courbure obtenue sur un voisinage de la frontière est déplorable. La mesure de l'erreur est donc polluée par les problèmes de précision liés à la frontière. Par ailleurs, la régularité de l'interface discrète implique la présence d'un bruit dans

les dérivées successives de l'approximation de la fonction distance signée à $\phi_{\Gamma_h^1}$. On retrouve dans Tornberg et Engquist (2000) et dans Olsson *et al.* (2007), l'insertion d'un filtre appliqué sur la courbure dans le but de supprimer ce bruit. La courbure κ est filtrée dans l'espace des fréquences (cf. Olsson *et al.* (2007)) par la résolution de l'équation suivante :

$$\tilde{\kappa} + \eta \Delta \tilde{\kappa} = \kappa, \quad \eta \in \mathbb{R}.$$

Ainsi, nous choisissons d'effectuer les mêmes expériences numériques avec une configuration où la surface libre n'est pas en contact avec la frontière du domaine. On note \mathcal{P}_1 un problème bifluide où l'interface est représentée par un cercle de centre $\mathbf{c} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ et de rayon $r = \frac{1}{4}$. Le diamètre de la région de transition est fixé à $\epsilon = \frac{1}{16}$. Nous choisissons d'appliquer le filtre sur la fonction distance signée afin de vérifier aussi l'impact de ce filtre sur le calcul de la normale. L'approximation ϕ_{Γ_h} est remplacée par une approximation de la solution de l'équation suivante :

$$\tilde{\phi} + 10^{-4} \Delta \tilde{\phi} = \phi_{\Gamma_h}. \quad (3.17)$$

La discrétisation de cette équation est effectuée à l'aide de la méthode de Galerkin et une condition libre est appliquée sur le bord. Le maillage utilisé est illustré à la figure 3.22. La figure 3.23(a) illustre l'approximation de la courbure pour le problème \mathcal{P}_1 où nous pouvons apprécier la présence du bruit. La figure 3.23(b) illustre l'efficacité du filtre (3.17) dont le résultat est une suppression du bruit sur le calcul de la courbure. Les figures 3.24 et 3.25 illustrent l'impact du filtre sur le calcul de la normale et de la courbure. Nous remarquons une amélioration négligeable pour le cas linéaire. Cependant, nous observons que pour $k > 1$ nous recouvrons la convergence avec un ordre 3 pour la précision de l'approximation de la normale et un ordre quadratique pour la précision de l'approximation de la courbure.

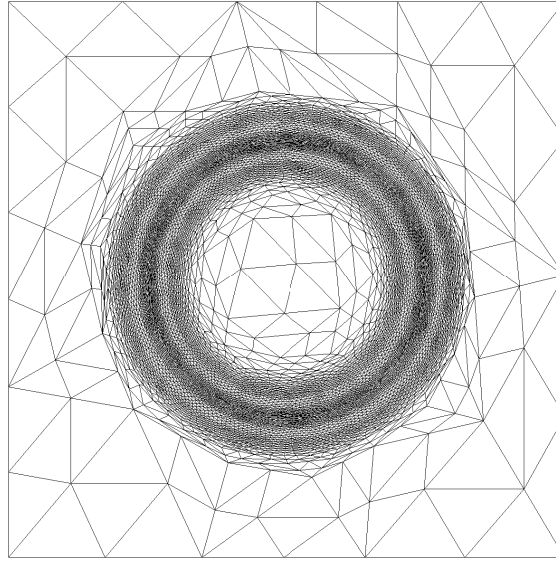


Figure 3.22: Le maillage utilisé pour les expériences numériques du problème \mathcal{P}_1

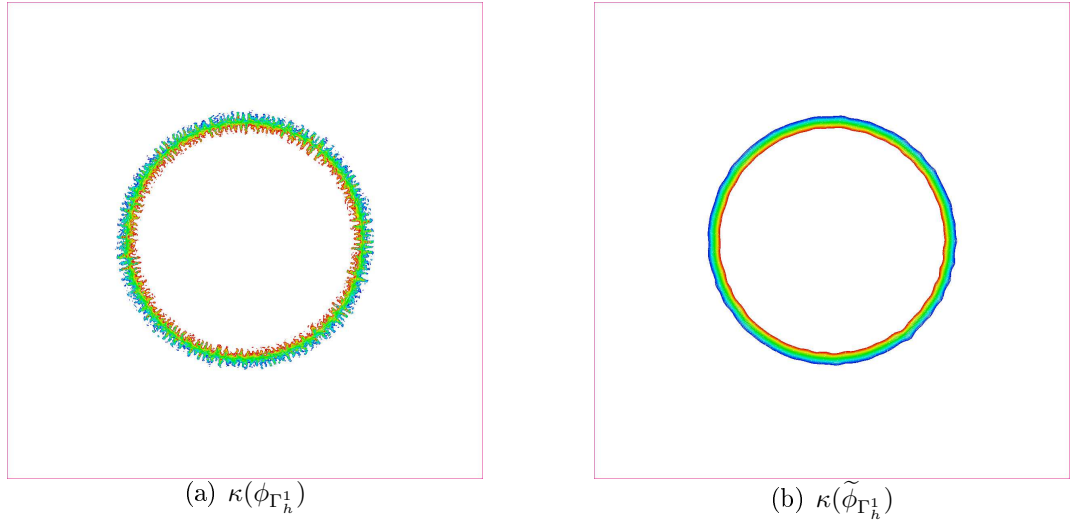


Figure 3.23: Illustration de l'effet du filtre (3.17) sur la régularité de l'approximation de la courbure pour le problème \mathcal{P}_1 . Les isosurfaces visualisées sont isolées entre 3,8 et 4,2.

L'approximation locale par des cercles au sens des moindres carrés

Dans cette section, on considère que chaque élément est traversé une seule fois par l'interface discrète. Cette affirmation n'est vrai que pour une discrétisation linéaire

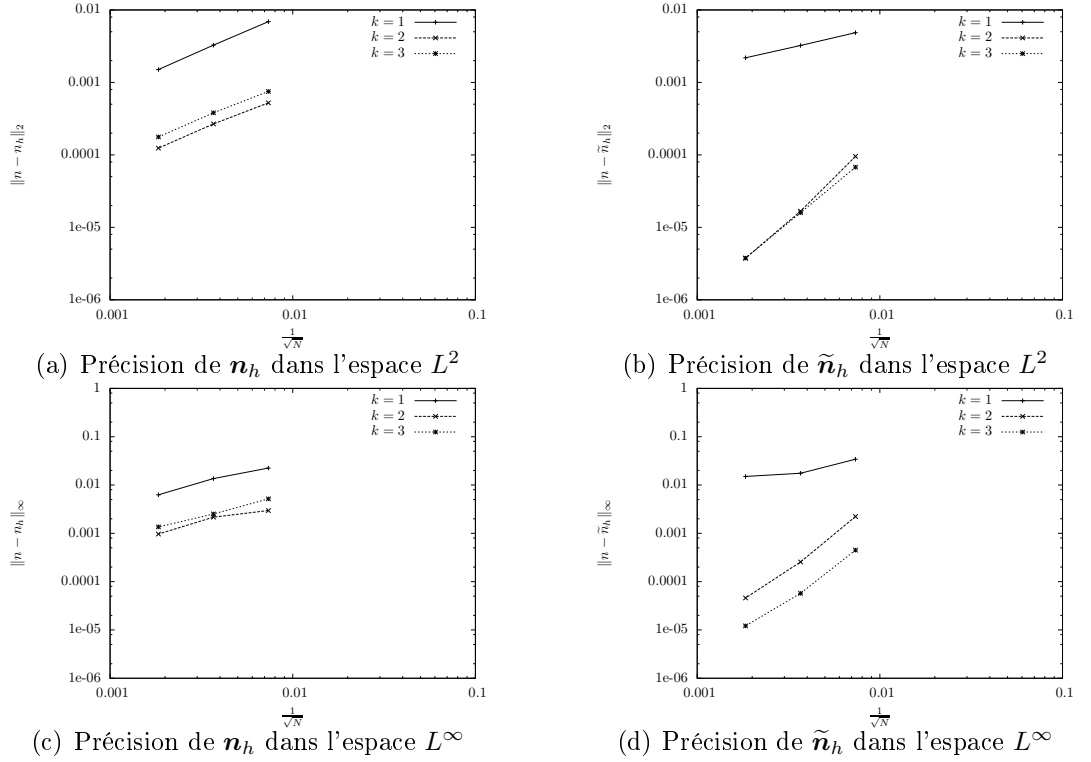


Figure 3.24: Convergence de la précision de $\|\mathbf{n} - \mathbf{n}_h\|$ pour la courbure calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\tilde{\phi}_{\Gamma_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}_1 .

de la variable eulérienne. Nous avons mentionné que le maillage était adapté pour qu'une variable linéaire soit une approximation précise. On supposera donc pour la suite que cette affirmation est vraie quelque soit le degré k .

Déterminer un cercle approximant un nuage de points au sens des moindres carrés est un problème non linéaire. La librairie que nous utilisons est MPFIT (Markwardt (2012)) qui utilise la méthode de Levenberg-Marquardt connue pour sa robustesse. Sur l'illustration proposée à la figure 3.9, nous calculons l'approximation d'un cercle au sens des moindres carrés sur l'ensemble des points de discrétisation de la surface libre explicite. Nous obtenons les résultats résumés au tableau 3.2. L'information obtenue est donc constante par élément, mais bénéficie d'une grande précision. On calcule ainsi une information sur la courbure appartenant à W_h^0 , c'est-à-dire que

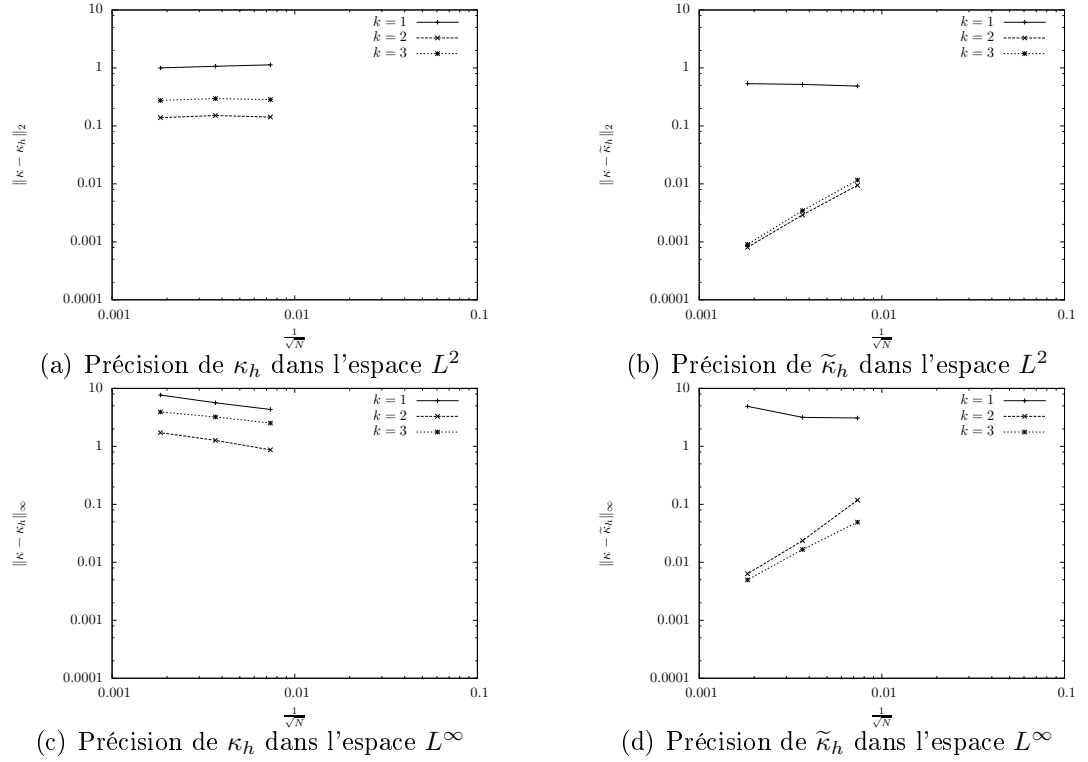


Figure 3.25: Convergence de la précision de $\|\kappa - \kappa_h\|$ pour la courbure calculée à partir de $\phi_{\Gamma_h^1}$ et $\tilde{\phi}_{\Gamma_h^1}$ pour le problème \mathcal{P}_1 .

Tableau 3.2: Approximation par un cercle au sens des moindres carrés de l'isosurface de valeur nulle de $I_h^k(1.3 - \|\mathbf{x} - (-1, \frac{1}{2})\|)$.

	valeur exacte	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$
x	-1	-5231,5	-0,7536	-0,9865	-0,9923
y	0,5	0,4380	0,4570	0,4948	0,4978
r	1,3	5231,7	1,0562	1,2858	1,2916

nous obtenons une courbure constante par élément, et non nulle sur les éléments traversés par l'interface. L'approche par les cercles aux moindres carrés est une belle idée, mais la précision n'est pas au rendez-vous, nous sommes très loin d'obtenir une courbure de qualité. La courbure obtenue est constante élément par élément et ne bénéficie pas d'une régularité, même avec le raffinement du maillage.

3.3.1 L'évaluation discontinue de la viscosité et de la densité

Les paramètres physiques comme la viscosité et la densité sont des quantités qui sont discontinues (nous considérons les écoulements de fluides incompressibles et isothermes). L'évaluation de ces paramètres, décrite au premier chapitre, s'effectue à l'aide de la pseudo-concentration. Nous avons proposé une méthode de réinitialisation de la pseudo-concentration permettant une évaluation convenable de ces quantités en maintenant une région de transition Ω_ϵ de diamètre local uniforme. Cependant, nous avons préconisé à la section précédente de réinitialiser la pseudo-concentration le moins souvent possible, ce qui implique tout de même une diffusion du diamètre local de la région de transition du marqueur entre les moments où les réinitialisations sont appliquées. Par ailleurs, lorsque l'évolution de la surface libre est telle que $\kappa > \frac{1}{\epsilon}$ ou lorsque l'épaisseur devient $< 2\epsilon$, la région de transition est trop large pour que la pseudo-concentration soit correctement définie (cf. chapitre 2). Si on prend l'exemple de l'évaluation de la viscosité dans un fluide dont l'épaisseur de Ω_ϵ devient $< 2\epsilon$, alors la viscosité réelle est partout inférieure à la viscosité est réelle puisque la pseudo-concentration est incapable d'atteindre la valeur 1 à l'intérieur du fluide. Ce problème peut être contourné en utilisant une intégration discontinue des intégrales impliquant ces paramètres :

$$\int_K \rho(H_\epsilon) g dK = \int_{K_1} \rho_1 g dK + \int_{K_2} \rho_2 g dK,$$

où g est une fonction quelconque et où $K_1 \subset K$, $K_1 \subset \Omega_1$, $K_2 \subset K$ et $K_2 \subset \Omega_2$. Grâce à la méthodologie présentée dans ce chapitre, nous sommes capable de calculer une triangulation (non conforme pour une meilleure précision) d'un triangle K tel que l'interface explicite Γ_h^1 soit exactement représentée par cette triangulation. En se basant sur cette triangulation, nous proposons un algorithme simple permettant de générer des formules de quadrature dans le but d'évaluer convenablement

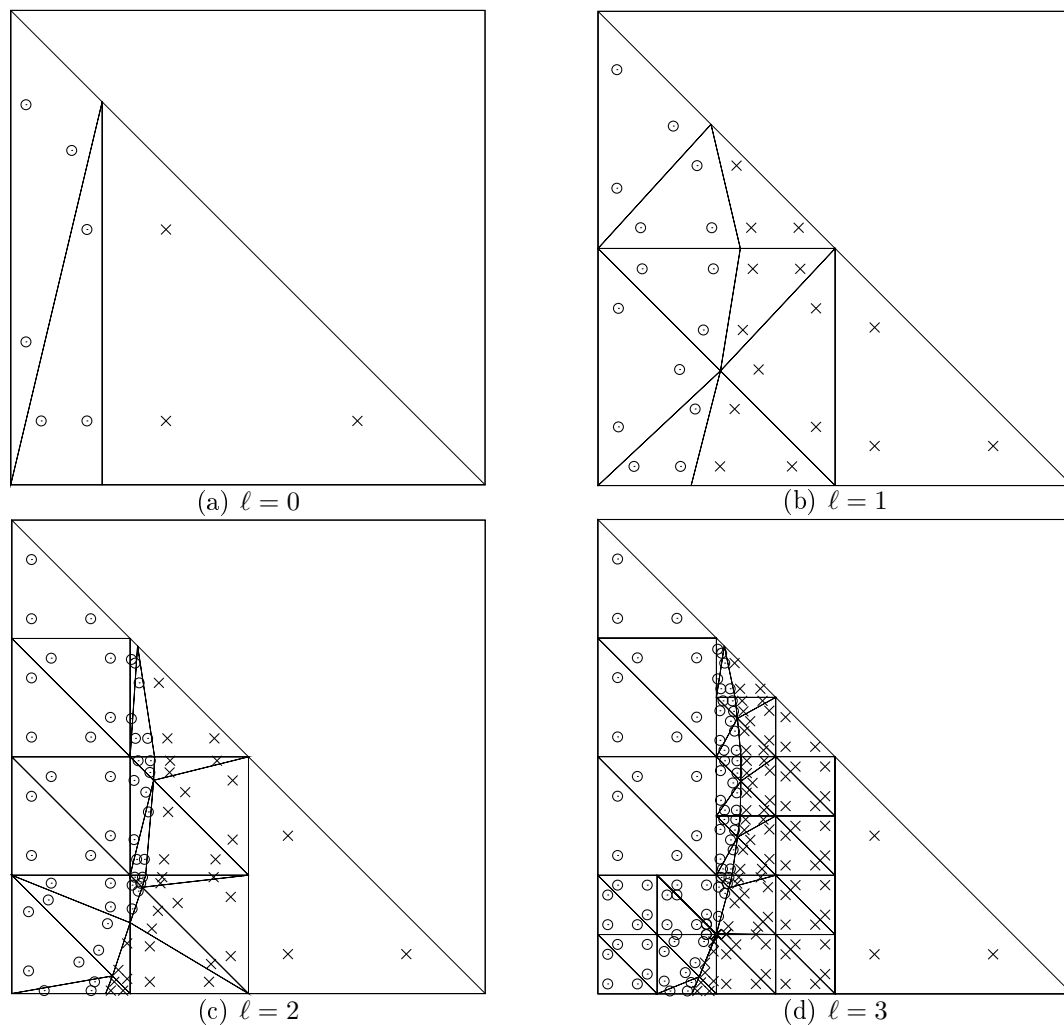


Figure 3.26: Illustration d'une formule de quadrature à 3 points, adaptée selon la surface libre.

les intégrales discontinues. On retrouve cette approche dans Marchandise et Remacle (2006). La figure 3.26 illustre une formule de quadrature à 3 points appliquée sur chacun des sous triangles formant le recouvrement de chacun des fluides.

3.4 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de proposer une méthode de réinitialisation de la pseudo-concentration dans le but de conserver une région de transition uniforme et contrôlée. Nous nous sommes basés sur une approche incluant une discrétisation explicite temporaire de la surface libre.

Concernant la conservation du volume fluide, nous avons vu que l'utilisation d'un schéma de discrétisation en temps d'ordre 1 ne semble pas donner de résultats satisfaisants. La réinitialisation de la pseudo-concentration a un impact néfaste sur la conservation du volume pour la méthode d'Euler rétrograde. Pour un schéma de discrétisation d'ordre 2, nous avons mis en évidence qu'il est possible de réinitialiser la pseudo-concentration sans avoir un impact significatif sur la fluctuation du volume du fluide. La conclusion est qu'il faut réinitialiser la pseudo-concentration le moins possible. Réinitialiser la pseudo-concentration au plus à tous les 25 pas de temps semble être un bon choix. Nous avons proposé une méthodologie permettant d'évaluer les paramètres physiques de façon discontinue avec une technique de génération adaptative de formules de quadrature. Nous avons ainsi limité l'impact de la diffusion de la région de transition à la force capillaire volumique. La méthode de réinitialisation que nous avons proposée permet de maintenir une zone de transition uniforme et contrôlée, et donc de maintenir la précision du modèle CSF en se basant sur la méthodologie présentée au chapitre 2.

Nous avons proposé un algorithme de régularisation cubique de la discrétisation explicite de l'interface. Avec cette régularisation, l'amélioration de la précision de la réinitialisation n'est significative que dans le calcul du gradient et de la normale. Nous avons également conclu que les ordres de convergence ne dépendent pas du degré d'approximation de la pseudo-concentration. La précision du calcul de la

courbure basé sur cette approche ne converge pas. Nous sommes déçus de la précision obtenue car nous avons concentré un effort important pour tenter d'améliorer ces résultats. La conclusion de ces expériences est qu'il ne faut pas utiliser la reconstruction de la fonction distance signée à partir de la pseudo-concentration pour calculer la courbure. Un post-traitement de $\phi_{\Gamma_h^1}$ semble inévitable, par exemple par la résolution de l'équation d'Eikonal, mais c'était précisément ce que nous voulions éviter. Nous avons proposé un compromis intéressant grâce à l'utilisation d'un filtre dans le but de supprimer le bruit présent dans les dérivées, c'est une équation supplémentaire à résoudre mais qui possède l'avantage d'être linéaire. Nous avons mis en évidence son efficacité sur un problème simple, nous retrouvons la convergence de la précision sur le calcul de la courbure, avec toutefois un ordre de convergence limité. C'est une perspective intéressante qui mériterait d'être approfondie. Ce chapitre propose une méthodologie qui permet d'effectuer une paramétrisation explicite de l'interface, de réinitialiser la pseudo-concentration, d'évaluer les intégrales impliquant les paramètres physiques de façon discontinue et de calculer une information de courbure dépourvue de bruit. Nous avons l'ensemble des éléments nécessaires pour proposer l'évaluation de la force capillaire par une intégrale de surface au lieu d'une intégrale de volume (cf. Tornberg et Engquist (2000)). Nous jugeons que c'est une perspective naturelle au vu du travail réalisé dans ce chapitre. Enfin, une autre perspective est d'étendre la méthodologie proposée pour être capable de traiter convenablement la frontière.

CHAPITRE 4

L'ADAPTATION

4.1 Résumé

L'adaptation de maillage est indispensable pour fournir une résolution suffisamment fine dans un voisinage de la surface libre. On augmente ainsi la précision des calculs par la réduction de la diffusion numérique (proportionnelle à la taille des éléments), tout en offrant un encadrement précis de la surface libre. L'étape de modification du maillage, qui ne fait pas l'objet de cette thèse, est assurée par la librairie « Object Oriented Remeshing Toolkit » (OORT, laboratoire MAGNU, École Polytechnique de Montréal). La méthodologie d'adaptation de maillage présente deux problèmes : le calcul de la métrique et l'interpolation des variables entre deux maillages.

Nous réintroduisons la boucle d'adaptation transitoire illustrée au premier chapitre (cf. figure 4.1). La première difficulté est de définir une métrique aux sommets pour gouverner les algorithmes de modifications du maillage, i.e. l'étape 1.4 suivie de l'étape 1.5. Les métriques que nous utilisons sont basées sur les dérivées premières, ou secondes, des variables prises en compte dans le processus d'adaptation. Les opérateurs de dérivation définis au deuxième chapitre nous permettent d'effectuer aisément ce calcul. Cette information tensorielle est convertie en une métrique, et nous présentons dans ce chapitre l'algorithme d'intersection de deux métriques permettant de compléter l'étape 1.4. Cette métrique est ensuite utilisée par l'étape de modification du maillage dont le but est de le rendre unitaire dans celle-ci (cf. étape 1.5). L'étape 1.3 constitue le critère d'arrêt de l'algorithme d'adaptation. Nous proposons une mesure de la convergence du point-fixe d'adaptation basée sur

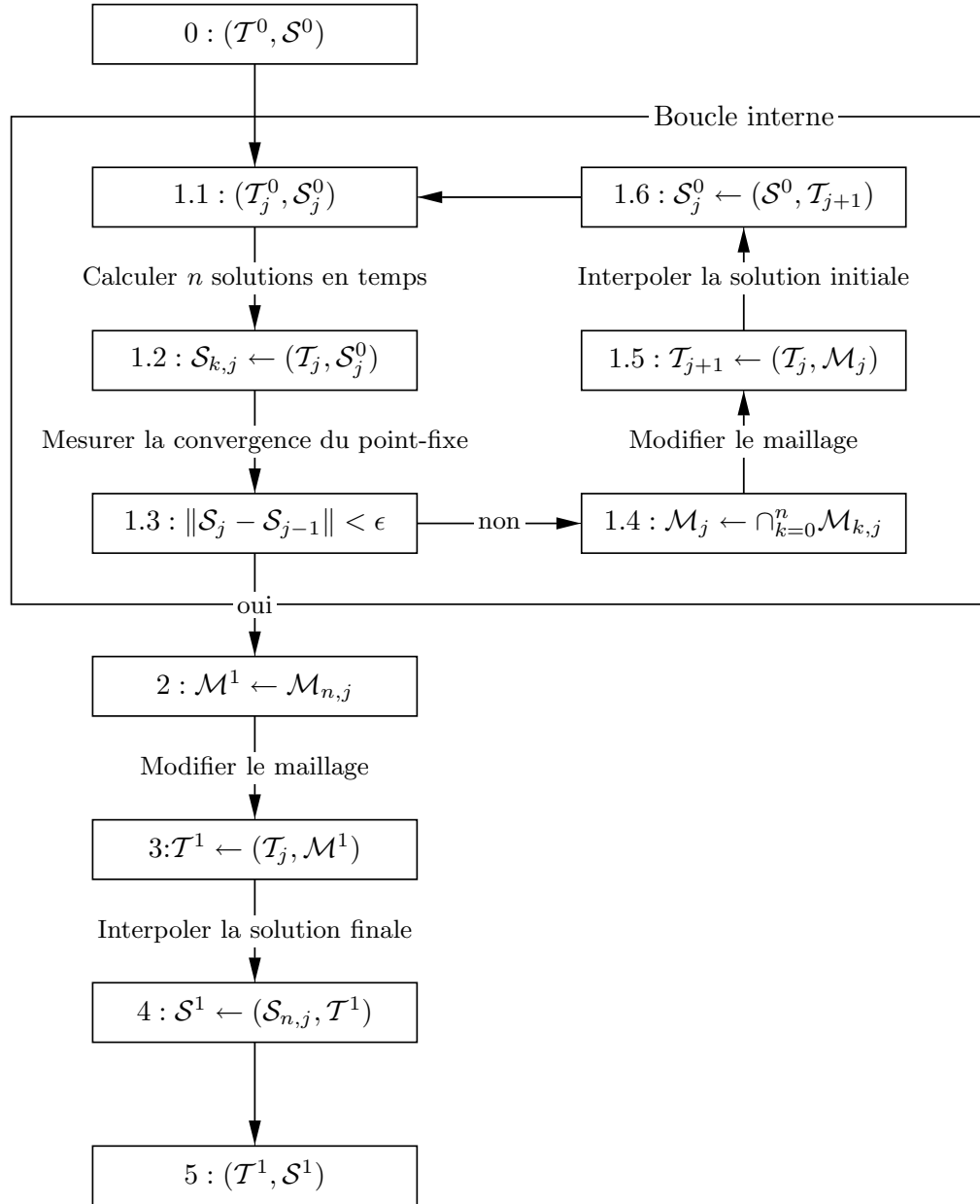


Figure 4.1: La boucle d'adaptation de maillage transitoire.

la conformité de la métrique.

La seconde difficulté est de définir un opérateur d'interpolation du maillage permettant d'interpoler une fonction éléments-finis entre deux discrétisations spatiales

qui ne coïncident pas (cf. étapes 1.6 et 4). Cette étape est nécessaire dans une simulation transitoire lorsque le maillage est modifié à un instant t donné. Elle permet ainsi de continuer le calcul transitoire, ou de le reprendre à un instant précédent si on veut adapter le maillage pour un intervalle de temps. Enfin, l'adaptation de maillage est une méthodologie qui offre la possibilité d'améliorer la précision des calculs avec une complexité algorithmique fixée, dans le cas où on veut avoir un contrôle sur le temps de calcul. Le déplacement de la surface libre implique une variation en temps de la résolution du maillage que la boucle d'adaptation va capturer. Cette capture nécessite plusieurs itérations, surtout lorsque le déplacement de l'interface sur l'intervalle de temps considéré est important, et notre but est de les effectuer de façon plus économique. Notre objectif est de raffiner préalablement le maillage dans les zones où la surface libre est censée se déplacer. Nous avons ainsi besoin de l'insertion d'un prédicteur (peu coûteux) en espace dans le processus d'adaptation transitoire.

L'objectif de ce chapitre est de proposer une méthodologie d'adaptation de maillage transitoire applicable aux problèmes à surface libre. Pour cela, nous avons identifié trois besoins auxquels il faut répondre. Nous proposons une description de la métrique utilisée pour la pseudo-concentration ainsi qu'une mesure de la conformité entre la métrique et le maillage adapté dans le but de proposer un critère d'arrêt peu coûteux. Nous proposons également une méthodologie d'interpolation qui permet d'interpoler convenablement les variables continues et discontinues. Enfin, nous proposons une méthodologie de prédiction en espace dans le but de réduire le nombre de résolutions des équations de l'écoulement dans la boucle d'adaptation de maillage.

4.2 La métrique

La notion de métrique a été introduite au premier chapitre. L'objectif de cette section est de proposer une métrique adéquate pour les problèmes à surface libre. Cette métrique doit être construite pour que les deux variables suivantes soient convenablement discrétisées : la pseudo-concentration F_h et le champ de vitesse \mathbf{u}_h . Dans cette section, nous nous basons sur les estimateurs d'erreur d'interpolation linéaire qui utilisent le hessien de la variable considérée. La métrique basée sur le hessien contient trois informations. La première est le repère de Fresnet des iso-surfaces de la variable, noté $\mathbf{V} = (\mathbf{n}, \mathbf{t})$ où $\mathbf{n} = \frac{\nabla f}{\|\nabla f\|}$. Les deux autres informations sont des indicateurs des erreurs d'interpolation linéaire dans chacune des directions portées par le repère. Le hessien d'une fonction scalaire f suffisamment régulière est diagonalisable dans cette base et s'exprime sous la forme

$$\nabla^2 f = \mathbf{V} \begin{pmatrix} v_n & 0 \\ 0 & v_t \end{pmatrix} \mathbf{V}^T,$$

où v_n et v_t sont les valeurs propres. Le modèle de l'erreur d'interpolation linéaire est basé sur le hessien :

$$\|f - I_h^1 f\|_{K,\infty} \leq C \max_{\mathbf{s} \in K} \mathbf{y}^T \begin{pmatrix} |v_n| & 0 \\ 0 & |v_t| \end{pmatrix} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{s}, \quad C \in \mathbb{R}.$$

On note $e(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{s} \in K} \mathbf{s}^T |\nabla^2 f| \mathbf{s}$ le modèle de l'erreur. La question est de savoir comment construire un maillage qui minimise $e(\mathbf{x})$. Une réponse à cette question est disponible dans Alauzet *et al.* (2006), où la minimisation de ce modèle (en

norme L^p) s'effectue par la recherche d'une métrique optimale

$$\min_{\mathcal{M}} \left(\int_{\mathcal{T}(\mathcal{M})} e(\mathbf{x})^p d\Omega \right)^{\frac{1}{p}},$$

où $\mathcal{T}(\mathcal{M})$ est un maillage unité dans la métrique \mathcal{M} . Loseille *et al.* (2009) démontrent que dans le cas de l'erreur d'interpolation linéaire, la métrique optimale possède des directions qui coïncident avec les directions portées par les vecteurs propres du hessien, i.e. le repère de Fresnet des isosurfaces de la fonction considérée. Cette formulation possède l'élégance de nécessiter l'imposition d'une contrainte sur la complexité du maillage dans le but de rendre la solution optimale non nulle. La contrainte appliquée est :

$$\mathcal{C}(\mathcal{M}) = N, \quad (4.1)$$

où N est le nombre de sommets fixé par l'utilisateur.

Nous introduisons maintenant les formules explicites permettant de calculer la métrique optimale. On se donne une fonction f , une métrique \mathcal{M} , et un maillage \mathcal{T} unité dans cette métrique. Nous avons le résultat suivant (Loseille *et al.* (2009)) :

$$\|f - I_h^1 f\|_{L^p(\Omega_h)} \leq \left(\int_{\Omega} \text{trace} \left(\mathcal{M}^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) |(\nabla^2 f)(\mathbf{x})| \mathcal{M}^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \right)^p d\Omega \right)^{\frac{1}{p}}, \quad (4.2)$$

où $|(\nabla^2 f)(\mathbf{x})| = |\mathbf{A}| = \sqrt{\mathbf{A}\mathbf{A}^T}$. Le terme de droite de l'équation (4.2) admet un minimum unique sous la contrainte (4.1). La métrique optimale s'exprime sous la forme (cf. Guégan *et al.* (2010), où nous posons la dimension $d = 2$) :

$$\mathcal{M}_{L^p} = \frac{N}{(\det|\nabla^2 f|)^{\frac{1}{2p+2}} \int_{\Omega} (\det|\nabla^2 f|)^{\frac{p}{2p+2}} d\Omega} |\nabla^2 f|.$$

Lorsque p est faible, le maillage est sensible aux faibles variations de la fonction f alors que la densité se concentre sur les fortes variations lorsque p augmente ($p = \infty$). Avec un maillage unité dans une telle métrique, l'erreur d'interpolation (linéaire) peut se majorer de la façon suivante :

$$\|f - I_h^1 f\| \leq \frac{2}{N} \left((\det |\nabla^2 f|)^{\frac{p}{2p+2}} \right)^{\frac{2p+2}{2p}} \leq \frac{C}{N} = \mathcal{O}(h^2).$$

Dans le cas où on préfère imposer une borne η sur l'erreur d'interpolation au lieu de spécifier la complexité du maillage, alors la relation précédente s'écrit :

$$\mathcal{M}_{L^p} = \frac{2}{\eta} (\det |\nabla^2 f|)^{-\frac{1}{2p+2}} \int_{\Omega} (\det |\nabla^2 f|)^{\frac{p}{2p+2}} |\nabla^2 f| d\Omega.$$

Le cas $p = \infty$ correspond à la métrique

$$\mathcal{M}_{L^\infty} = \left(\frac{2}{\eta} \int_{\Omega} (\det |\nabla^2 f|)^{\frac{1}{2}} d\Omega \right) |\nabla^2 f|.$$

Les problèmes bifluides avec adaptation de maillage ont été notamment abordés par Guégan *et al.* (2010), qui proposent une méthodologie d'adaptation de maillage combinant les normes L^p et L^∞ . L'erreur d'interpolation du champ de vitesse est minimisée en norme L^p et l'erreur d'interpolation de la variable eulérienne est minimisée en norme L^∞ . La méthodologie d'adaptation est conçue de manière à contrôler l'erreur de discrétisation en temps par la discrétisation en espace.

4.2.1 La métrique pour la pseudo-concentration

Nous proposons ici la définition de la métrique pour la pseudo-concentration. Nous avons vu au précédent chapitre que si le maillage \mathcal{T} est unité pour la métrique

$$\mathbf{M}_\Gamma = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \frac{1}{\eta^2} & 0 \\ 0 & \frac{|\kappa_\Gamma|}{\eta} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \frac{1}{h_n^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{h_t^2} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T, \quad (4.3)$$

où \mathbf{V} est la matrice représentative du repère de Fresnet $(\mathbf{n}_\Gamma, \mathbf{t}_\Gamma)$ et h_n et h_t sont les prescriptions de tailles des éléments dans les directions normale et tangente à l'interface; alors nous obtenons un encadrement de l'interpolation linéaire de la surface libre. En se basant sur la définition de la régularisation de la fonction de Heaviside, vue au second chapitre, la métrique basée sur le hessien de la pseudo-concentration s'exprime sous la forme

$$\mathbf{M}_F = |\nabla^2 H_\epsilon(\phi)| = |v''(\phi)| \nabla \phi \otimes \nabla \phi + |v'(\phi)| |\nabla^2 \phi|.$$

Si on se place à l'interface, alors

$$\mathbf{M}_F(\Gamma) = |v'(0)| |\nabla^2 \phi| = \mathbf{V} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & |v'(0)| |\Delta \phi| \end{pmatrix} \mathbf{V}^T.$$

Le hessien de la pseudo-concentration n'est pas une bonne information puisque la taille prescrite à l'interface est $h_n = h_{\max}$. Une solution consiste à majorer les fonctions v' et v'' . Nous obtenons alors :

$$\mathbf{M}_F = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \max_\xi |v''(\xi)| & 0 \\ 0 & \max_\xi |v'(\xi)| |\kappa_\Gamma| \end{pmatrix} \mathbf{V}^T = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \frac{C_1}{\epsilon^2} & 0 \\ 0 & \frac{C_2 |\kappa_\Gamma|}{\epsilon} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T,$$

où $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$. Notons qu'avec cette métrique, on retrouve le cas (4.3) où on pose $\eta = \epsilon$. La densité de cette métrique est donnée par

$$d_M = C \sqrt{\frac{|\kappa|}{\epsilon^3}},$$

avec $C \in \mathbb{R}$, et le quotient anisotrope r_M (1.73) s'exprime sous la forme

$$r_M = \sqrt{\epsilon|\kappa|}.$$

Comme nous l'avons mentionné au précédent chapitre, nous avons

$$\max \kappa < \frac{1}{\epsilon} \iff r_M < 1.$$

Cette condition est une condition nécessaire pour que la pseudo-concentration soit correctement définie. Cette condition s'exprime aussi par la nécessité d'avoir un étirement du triangle dans la direction tangente à la surface libre. La taille dans la direction de la normale doit être inférieure à la taille dans la direction de la tangente. Il est important de remarquer que cette condition n'est malheureusement pas suffisante car d'autres problèmes surviennent lorsque deux surfaces libres se situent à une distance $< 2\epsilon$ tout en possédant une courbure nulle. Généralement, les remaillages ne donnent pas d'excellents résultats lorsqu'une métrique contient des discontinuités dans les tailles ou dans les directions. Il est certain que les outils de lissage de métrique sont efficaces, mais il est préférable de mieux définir les transitions de tailles de la métrique. Une approche intéressante, que l'on retrouve dans Olsson *et al.* (2007), est d'utiliser la fonction

$$\Phi(\mathbf{x}) = 4F_h(1 - F_h)$$

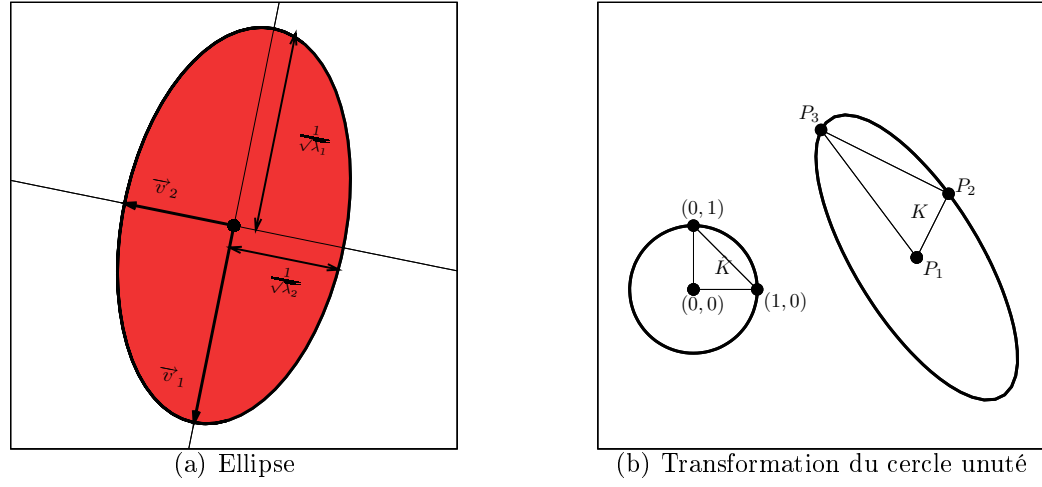


Figure 4.2: Caractérisations du tenseur métrique

pour régulariser les tailles. Nous obtenons alors la métrique :

$$\mathbf{M}_F = \mathbf{V} \begin{pmatrix} C_1 \frac{\Phi(\mathbf{x})}{\epsilon^2} & 0 \\ 0 & C_2 \frac{\Phi(\mathbf{x})|\kappa_\Gamma|}{\epsilon} \end{pmatrix} \mathbf{V}^T. \quad (4.4)$$

Remarque 4.1 La métrique (4.4) présente l'avantage d'être définie sur la région de transition Ω_ϵ . L'inconvénient de la diffusion de Ω_ϵ devient ici un bon indicateur des directions où la surface libre évolue.

La complexité d'un maillage unité dans la métrique (cf. équation (1.75)) s'exprime sous la forme

$$\mathcal{C}(\mathcal{M}_F) = \int_{\Omega} d_{\mathcal{M}_F} d\Omega = \sqrt{\frac{\max_{\Gamma} |\kappa|}{\epsilon^3}} |\Gamma|$$

où $|\Gamma|$ représente la longueur de la surface libre. Le nombre d'éléments nécessaire pour discrétiser la région de transition dépend donc de deux paramètres : la courbure locale et la largeur de la zone de transition ϵ . De plus, si on considère que la

condition $\kappa < \frac{1}{\epsilon}$ est respectée, alors

$$\mathcal{C}(\mathcal{M}_F) = O(\epsilon^{-2}|\Gamma|).$$

Si on divise ϵ par 2, la complexité du maillage permettant de discrétiser la pseudo-concentration, avec la même tolérance sur l'erreur d'interpolation (linéaire), sera multipliée par 4.

Nous avons vu que la densité de la métrique (et donc la complexité du maillage) n'est pas invariante en temps. Elle dépend de la courbure et de la longueur de la surface libre. La complexité du maillage pour définir convenablement l'interface dépend donc de la complexité de l'écoulement à modéliser. Par exemple, avec les instabilités de Rayleigh-Taylor la surface libre évolue partout sur le domaine avec des courbures locales d'apparence aléatoire. Si on impose la contrainte sur la densité de la métrique, généralement pour une question de temps d'exécution, alors la borne sur l'erreur d'interpolation de la pseudo-concentration va s'accroître, menant à une discrétisation médiocre de la variable eulérienne si le nombre N de sommets n'est pas suffisamment grand. C'est pourquoi nous jugeons qu'imposer la contrainte de complexité sur le calcul de la métrique représentative de la pseudo-concentration n'est pas un bon choix pour une simulation transitoire. Nous préférons limiter l'erreur d'interpolation tout en acceptant que la complexité du maillage évolue dans le temps. Il faut noter qu'il y a une exception. Imposer une contrainte sur la complexité du maillage a du sens lorsque la surface libre est non déformable (cf. problème du « disque de Zalesak » vu au chapitre précédent), puisque dans ce cas la courbure et la longueur de l'interface sont invariants dans le temps.

Le calcul de la métrique et l'erreur d'interpolation quadratique

Pour appliquer les estimateurs d'erreur d'interpolation linéaire sur des variables quadratiques, une approche possible consiste à considérer le modèle de l'erreur d'interpolation linéaire sur le gradient par l'introduction de la variable

$$G = \nabla F_h \cdot \nabla F_h \approx \delta_{\Gamma, \epsilon}.$$

G correspond à la dérivée directionnelle de la pseudo-concentration dans le sens du gradient. Le hessien de cette variable est également diagonalisable dans le repère de Fresnet puisque cela correspond à adapter le maillage pour contrôler l'erreur d'interpolation d'une régularisation de la fonction de Dirac à l'interface $\delta_{\Gamma, \epsilon}$. Notons que le gradient de G s'écrit

$$\nabla G = 2\nabla^2 F_h \nabla F_h = 2\alpha \nabla F_h,$$

où α est la valeur propre associée.

Notons qu'une information temporelle peut être introduite par l'utilisation de la variable

$$G_t = \nabla F_h \cdot \nabla F_h + \left(\frac{\partial F}{\partial t} \right)^2,$$

où en tenant compte de l'équation de transport, nous avons

$$G_t = \nabla F_h \cdot \nabla F_h + (\mathbf{u}_h \cdot \nabla F_h)^2 = \nabla F_h \cdot ((\mathbf{I} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \nabla F_h).$$

Le calcul de la métrique sur la frontière

Sur la frontière du domaine, calculer les dérivées convenablement est un problème réel, auquel nous ne nous sommes pas intéressés dans cette thèse. La métrique calculée sur ces dérivées reflète bien entendu la piètre précision des reconstructions obtenues. La stratégie est la suivante. La métrique n'est jamais calculée sur la frontière $\partial\Omega$ du domaine. On prescrit une taille de maille extrêmement grande. L'utilisation d'un lisseur gomme l'absence d'information sur la frontière en fonction des métriques prescrites aux sommets qui sont connectés avec $\partial\Omega$.

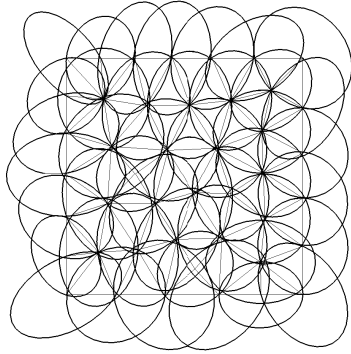
4.2.2 La métrique pour le champ de vitesse

Le champ de vitesse est une variable vectorielle. Nous proposons l'insertion d'une variable temporaire sur laquelle nous appliquons les estimateurs d'erreur menant à la construction des métriques que nous avons décrites, soit le carré de la norme du champ de vitesse

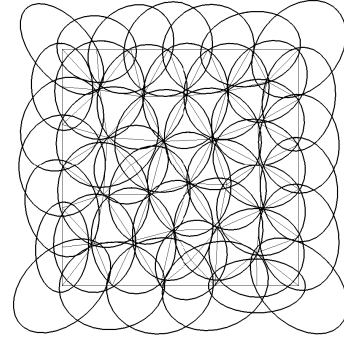
$$G_u = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}.$$

Si le champ de vitesse est nul au bord du domaine, lorsque le maillage est adapté sur la norme du champ de vitesse au lieu du carré de la norme, nous obtenons un raffinement important du maillage dans un voisinage de la frontière à cause de la non différentiabilité d'une norme à l'origine. C'est un détail qui peut avoir son importance lorsque le maillage doit être adapté sur des couches limites.

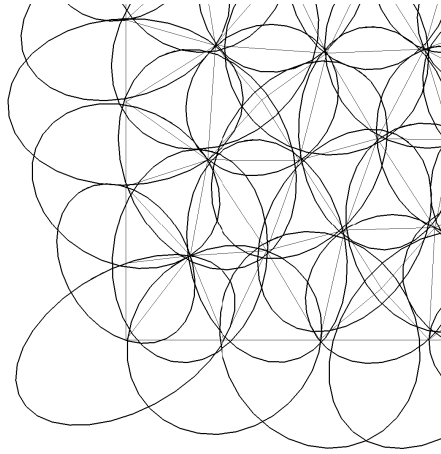
On peut aussi vouloir construire un maillage tel que les éléments soient étirés soit dans la direction des lignes de courant (la direction portée par \mathbf{u}), soit dans la direction orthogonale aux lignes de courant. Le tenseur $\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}$ admet un sous-espace propre orthogonal à \mathbf{u} , i.e. que l'unique valeur propre non nulle associée au



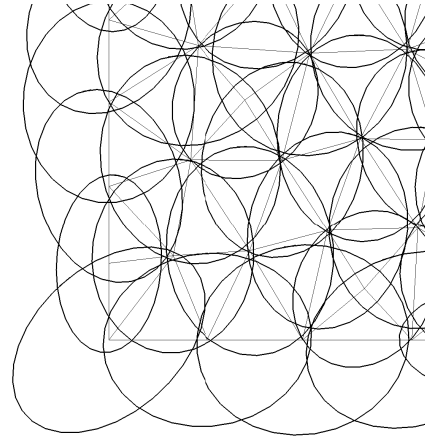
(a) métrique naturelle aux moindres carrés



(b) métrique naturelle statistique



(c) Agrandissement de (a)



(d) Agrandissement de (b)

Figure 4.3: Métrique naturelle du maillage

vecteur propre \mathbf{u} est précisément le carré de la norme (euclidienne) du vecteur de vitesse.

4.2.3 La conformité de la métrique

Dans le cas où nous sommes en possession d'un maillage démunie d'une métrique, on peut vouloir calculer une métrique pour laquelle ce maillage est unité. Nous appelons cette métrique la métrique naturelle d'un maillage, ou encore la métrique

géométrique d'un maillage. La métrique naturelle d'un maillage est une métrique discrète construite à partir des informations du maillage, i.e. la position des noeuds. Pour un sommet $\mathbf{P}_i \in \mathcal{T}_h$, on note \mathbf{P}_{ij} , $1 \leq j \leq n$, l'ensemble des n sommets connectés au sommet \mathbf{P}_i . On note aussi $\mathbf{v}_{ji} = \mathbf{P}_{ji} - \mathbf{P}_i = (x_i, y_i)$.

Une première approche consiste à calculer une métrique aux moindres carrés où on cherche $\mathbf{M}_i = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ telle que

$$\begin{pmatrix} x_1^2 & 2x_1y_1 & y_1^2 \\ x_2^2 & 2x_2y_2 & y_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n^2 & 2x_ny_n & y_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

avec $n \geq 3$. Une décomposition en valeur singulière est tout indiquée pour résoudre ce système linéaire surdéterminé.

Coupez (2010) propose une approche statistique, beaucoup moins coûteuse que celle que nous venons de mentionner. Il calcule une métrique naturelle de la façon suivante :

$$\mathbf{M}_T = \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^n \mathbf{v}_{ji} \otimes \mathbf{v}_{ji} \right)^{-1}. \quad (4.6)$$

La métrique naturelle reconstruite à l'aide du système d'équations (4.5) est illustrée à la figure 4.3(a) où à chaque sommet du maillage est affichée l'ellipse représentative de la métrique. On remarque que la distance des sommets à l'ellipse est plus faible comparativement à la méthode proposée par Coupez (2010) et illustrée à la figure 4.3(b).

Une autre métrique naturelle, définie cette fois-ci élément par élément, est basée sur la transformation affine de l'élément de référence \widehat{K} vers l'élément K (introduite

avec l'équation (1.33)). Cette transformation s'écrit

$$\mathbf{x} = \mathcal{F}_K(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{M}_K \hat{\mathbf{x}} + t_K,$$

où \mathbf{M}_K désigne le jacobien et t_K désigne la translation. Puisque la transformation \mathcal{F}_K est bijective, \mathbf{M}_K admet une décomposition en valeurs singulières de la forme

$$\mathbf{M}_K = \mathbf{R}_K^T \mathbf{J}_K \mathbf{P}_K$$

et le tenseur

$$\mathbf{T}_K = \mathbf{R}_K^T \mathbf{J}_K^{-2} \mathbf{R}_K$$

est un tenseur dans lequel l'élément K est unité (Picasso (2006)) (cf. figure 4.2(b)).

La notion de métrique naturelle permet de définir un critère de conformité d'un maillage relativement à une métrique. Un critère de conformité est une mesure de l'écart entre la métrique prescrite et la métrique naturelle. Tchon *et al.* (2006) proposent un critère de conformité d'un élément vis-à-vis de la métrique prescrite à ses sommets :

$$Q(K) = \alpha \min_{1 \leq i \leq 3} \frac{\sqrt{\det(\mathbf{M}_i)} |K|}{\sum_{1 \leq i, j \leq 3} (\mathbf{P}_k - \mathbf{P}_j)^T \mathbf{M}_i (\mathbf{P}_k - \mathbf{P}_j)}. \quad (4.7)$$

Le coefficient α est choisi de manière à ce que $Q(K) = 1$ pour un triangle parfaitement équilatéral dans la métrique euclidienne, donnant ainsi un indicateur de conformité compris entre 0 et 1. Un autre critère de conformité entre deux métriques est proposé par Labbé *et al.* (2011)

$$Q(\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2) = \|(2\mathbf{I} - \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_2^{-1} \mathbf{M}_1)\|_F, \quad (4.8)$$

avec la norme de Frobenius notée $\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\text{trace}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}$. Nous choisissons la

métrique naturelle (4.6) et le critère (4.8) pour proposer une mesure de la conformité entre un maillage et une métrique :

$$Q(\mathcal{M}, \mathcal{M}_T) = \max_{\mathbf{z}_i \in T} Q(\mathcal{M}(\mathbf{z}_i), \mathcal{M}_T(\mathbf{z}_i)).$$

4.2.4 L'intersection de la métrique

Dans le cas où plusieurs métriques sont spécifiées en un même sommet du maillage, on cherche alors à définir une unique métrique représentative de toutes ces métriques. La notion d'intersection de métriques a été introduite au premier chapitre, où nous avons présenté l'intersection « classique ». Le problème avec cet algorithme d'intersection survient lorsqu'on intersecte deux métriques \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 identiques. Les directions de la métrique résultante sont portées par les vecteurs propres de la matrice $\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M}_2$, donc du repère cartésien lorsque $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2$. L'intersection est donc mal posée, et nous sommes fréquemment confrontés à cette situation lors de l'adaptation transitoire où la métrique calculée résulte d'un grand nombre d'opérations d'intersections sur des métriques qui ne varient que localement. Une solution consiste à détecter la matrice identité lorsque la matrice $\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M}_2$ est construite, mais nous considérons cette approche numériquement peu satisfaisante. Il existe une méthode qui répond à nos besoins. Nous présentons la méthode d'intersection proposée par McKenzie *et al.* (2009) que nous jugeons mieux posée.

On se donne deux tenseurs métriques \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 . Rappelons que le tenseur résultant de l'intersection des métriques \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 se caractérise par une ellipse ξ_M de surface maximale (de volume maximal en dimension 3) incluse dans l'intersection géométrique des ellipses ξ_1 et ξ_2 . On introduit la décomposition du tenseur basée

sur les matrices de rotations pour obtenir

$$\mathbf{M}_1 = \mathbf{R}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{R}_1^T = \mathbf{R}_1 \sqrt{\mathbf{D}_1} \sqrt{\mathbf{D}_1} \mathbf{R}_1^T = \mathbf{N}_1 \mathbf{N}_1^T,$$

où $\mathbf{N}_1 = \sqrt{\mathbf{D}_1} \mathbf{R}_1^T$. La matrice \mathbf{N}_1^{-1} est la matrice représentative de la transformation T_1 de l'ellipse ξ_{M_1} vers le cercle unité ξ_I . Nous avons

$$\begin{aligned} T_1 : \xi_M &\longrightarrow \xi_I \\ \mathbf{x} &\longmapsto \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{N}_1(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

On associe alors la décomposition $\mathbf{M}_1 = \mathbf{N}_1^T \mathbf{N}_1$ à l'ellipse ξ_1 définie par l'ensemble

$$\xi_1 = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \mathbf{T}^{-1}(\mathbf{y}) = \mathbf{N}_1^{-1} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \in \xi_I \}.$$

L'idée de la méthode d'intersection proposée par McKenzie *et al.* (2009) est d'effectuer l'intersection sur une transformation des ellipses ξ_1 et ξ_2 . On applique la transformation (4.9) pour obtenir les ellipses ξ'_1 et ξ'_2 :

$$\begin{aligned} \xi'_1 &= T_1(\xi_1) = \xi_I; \\ \xi'_2 &= T_1(\xi_2) = T_1(T_2^{-1}(\xi_I)). \end{aligned}$$

L'ellipse ξ'_2 est donc définie par

$$\xi'_2 = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} = (\mathbf{N}_1 \mathbf{N}_2^{-1})^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{N}_2 \mathbf{N}_1^{-1} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \in \xi_I \},$$

à laquelle nous associons le tenseur $\mathbf{M}_3 = \mathbf{N}_3^T \mathbf{N}_3$, où $\mathbf{N}_3 = \mathbf{N}_1 \mathbf{N}_2^{-1}$. L'intersection est calculée sur les ellipses transformées. Nous avons

$$\xi'_1 \cap \xi'_2 = \xi_I \cap \xi'_2.$$

Les axes de l'ellipse d'intersection $\xi'_1 \cap \xi'_2$ coïncident avec les axes de ξ'_2 et les tailles sont simplement ajustées pour que $\xi'_1 \cap \xi'_2$ soit incluse dans le cercle unité avec une aire maximale. Prendre le minimum des tailles revient à prendre le maximum des valeurs propres, c'est pourquoi

$$\mathbf{M}_4 = \mathbf{R}_3 \begin{pmatrix} \max(1, D_{3,1}) & 0 \\ 0 & \max(1, D_{3,2}) \end{pmatrix} \mathbf{R}_3^T = \mathbf{N}_4^T \mathbf{N}_4,$$

où $\mathbf{N}_4 = \begin{pmatrix} \sqrt{\max(1, D_{3,1})} & 0 \\ 0 & \sqrt{\max(1, D_{3,2})} \end{pmatrix} \mathbf{R}_3^T$. L'ellipse d'aire maximale et contenue dans $\xi_I \cap \xi'_2$ est alors définie par

$$\xi_I \cap \xi'_2 = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \mathbf{N}_4^{-1} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \in \xi_I \}.$$

Finalement, l'ellipse intersection est obtenue en appliquant la transformation T_1^{-1} :

$$\xi_1 \cap \xi_2 = T_1^{-1}(\xi_I \cap \xi'_2) = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \mathbf{N}_1^{-1} \mathbf{N}_4^{-1} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} \in \xi_I \},$$

qui est une représentation de la métrique désirée :

$$\mathbf{M}_1 \cap \mathbf{M}_2 = \mathbf{N}_5^T \mathbf{N}_5,$$

où $\mathbf{N}_5 = \mathbf{N}_4 \mathbf{N}_1$. L'algorithme 4 résume l'opérateur d'intersection.

4.3 L'interpolation entre deux maillages

L'interpolation entre deux maillages correspond à l'étape (1.6) de la boucle d'adaptation présentée à la figure 4.1. On se donne deux maillages, que l'on note \mathcal{T}_{j+1} et \mathcal{T}_j , correspondant à deux itérations successives de la boucle d'adaptation de maillage.

Algorithme 4 L'intersection de deux métriques

ENTRÉES: M_1, M_2
SORTIES: $M_{1 \cap 2} = M_1 \cap M_2$

- calculer N_1 tel que $M_1 = N_1^T N_1$;
 - calculer N_2 tel que $M_2 = N_2^T N_2$;
 - calculer $N_3 = N_1 N_2^{-1}$;
 - calculer $M_3 = N_3^T N_3$;
 - calculer R_3 et D_3 tel que $M_3 = R_3 D_3 R_3^T$;
 - calculer $N_4 = \begin{pmatrix} \max(1, D_{3,1}) & 0 \\ 0 & \max(D_{3,2}, 1) \end{pmatrix} R_3^T$;
 - calculer $N_5 = N_4 N_1$;
 - calculer $M_{1 \cap 2} = N_5^T N_5$.
-

Le problème est le suivant : comment interpoler une fonction de type éléments-finis $f_h(\mathcal{T}_j)$ sur le nouveau maillage \mathcal{T}_{j+1} ? Nous abordons deux méthodes. La première méthode est une évaluation ponctuelle. C'est la plus simple des approches. La deuxième méthode s'appuie sur la triangulation de l'intersection d'un triangle $K \in \mathcal{T}_{i+1}$ avec le maillage \mathcal{T}_i . C'est une approche plus élaborée, donc plus complexe à mettre en oeuvre. Alauzet et Mehrenberger (2010) proposent une méthodologie compliquée (localisation et intersection) mais optimale en coût algorithmique ($\mathcal{O}(1)$) et en coût mémoire. La méthode que nous proposons s'appuie de façon simple sur la méthodologie de discrétisation des isosurfaces que nous avons définie au chapitre précédent. La localisation d'un élément contenant un point donné est basée sur les arbres de localisation spatiale construits sur les boîtes englobantes des éléments dont le coût associé à une recherche est $\mathcal{O}(\log(N_e))$, où N_e est le nombre d'éléments du maillage. On obtient un recouvrement du triangle (cf. figure 4.4(a)). Le coût mémoire et le coût algorithmique ne sont pas optimaux mais nous avons privilégié une approche simple et robuste. En partant du principe qu'on effectue cette opération rarement, la performance de l'ensemble de la simulation numérique n'est pas affectée.

4.3.1 L'interpolation par évaluation ponctuelle

On se donne un triangle K de sommets \mathbf{z}_j , $0 \leq j \leq 2$. Pour un point $\mathbf{x} \in \Sigma_h^k(\mathcal{T}_{i+1})$, on interpole la fonction $I_{\mathcal{T}_i}^k f$ par

$$\overline{F}_h(\overline{\mathbf{x}}) = \mathcal{N}_j^k(\overline{\mathbf{x}}) F_h(\mathbf{x}_j).$$

Cette approche possède l'avantage d'être simple. Si $k = 1$, alors la méthode est monotone et satisfait le principe du maximum :

$$\overline{F}_h(\overline{\mathbf{x}}) \leq \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{T}} F_h(\mathbf{x});$$

$$\overline{F}_h(\overline{\mathbf{x}}) \geq \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{T}} F_h(\mathbf{x}).$$

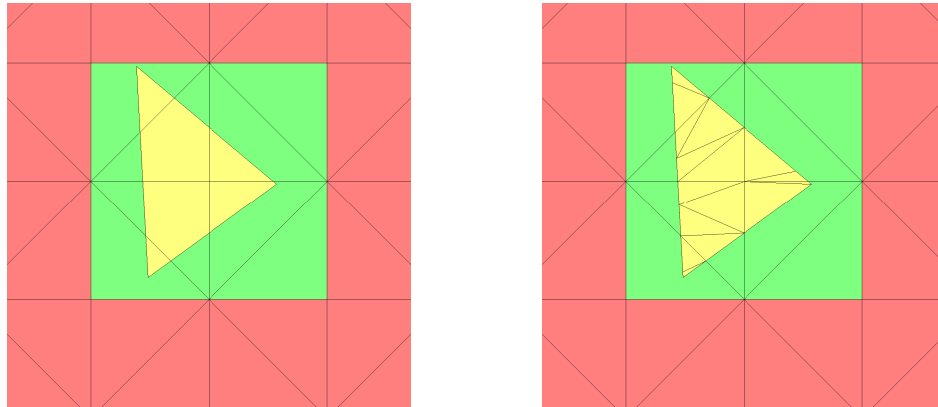
Le désavantage réside dans le fait que cette méthode n'est pas conservative pour les normes L_1 et L_2 . La principale difficulté rencontrée est de traiter convenablement les chevauchements des frontières $\partial\mathcal{T}_{i+1}$ et $\partial\mathcal{T}_i$. En effet, lorsqu'un point $\mathbf{x} \in \mathcal{T}_{i+1}$ n'est pas contenu dans un des éléments du maillage \mathcal{T}_i , il suffit simplement de remplacer le point par sa projection sur la frontière $\partial\mathcal{T}_i$.

Cette méthode possède les désavantages suivant :

- n'est pas conservative ;
- ne s'applique pas sur des fonctions discontinues $f_h \in W_h^k(\mathcal{T}_i)$.

4.3.2 L'interpolation par projection au sens L^2

Pour effectuer une projection au sens L^2 , l'approche naïve consiste non pas à localiser les noeuds d'interpolation, mais les points de quadrature sur chacun des éléments. On propose une meilleure approche, plus précise et qui est capable de



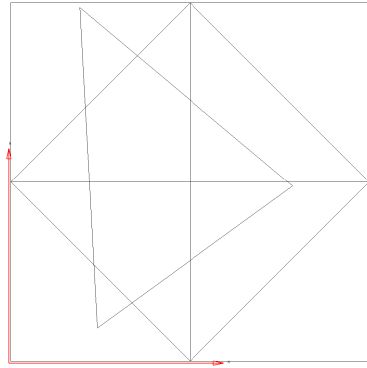
(a) Le recouvrement du triangle $K \in \mathcal{T}_{j+1}$ sur le maillage \mathcal{T}_j . (b) La triangulation de l'intersection du triangle et de son recouvrement.

Figure 4.4: Illustration de la triangulation de l'intersection d'un triangle avec un maillage.

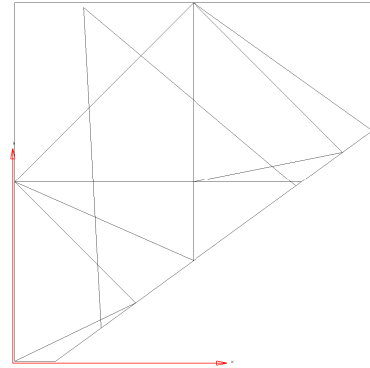
traiter convenablement les chevauchements aux bords. Nous utilisons l'intersection d'un triangle avec un maillage (cf. figure 4.4(b)).

Comment intersecter un triangle avec le maillage en utilisant la méthodologie que nous avons développée jusqu'ici ? L'idée est de discrétiser explicitement l'isosurface de valeur nulle de la fonction distance signée au bord du triangle, et de générer une formule de quadrature comme nous l'avons fait pour la construction des formules adaptatives présentée au chapitre précédent.

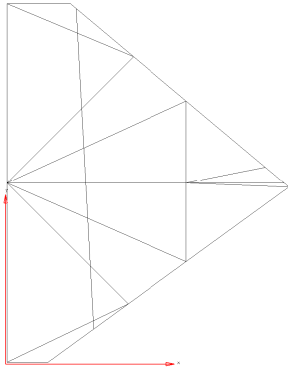
Pourquoi la fonction distance signée au bord du triangle n'est pas un bon choix ? Il n'est possible d'interpoler exactement la distance signée au bord du triangle que dans le cas où les sommets du triangle appartiennent à la triangulation. Dans le cas contraire, les coins ne peuvent être représentés exactement par la discrétisation explicite. Ils sont rognés sur un voisinage de la taille du diamètre de l'élément. Il faut procéder autrement. Nous proposons l'algorithme 5. Les figures 4.5(a), 4.5(b), 4.5(c) et 4.5(d) illustrent l'ensemble des étapes menant à la triangulation d'un élément avec son recouvrement.



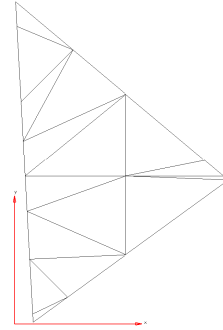
(a) Le triangle et son recouvrement



(b) Première étape de triangulation du domaine



(c) Deuxième étape de triangulation du domaine



(d) Dernière étape

Figure 4.5: Illustration de la construction de la triangulation de l'intersection d'un triangle avec un maillage

Nous appliquons un test simple en appliquant une boucle d'adaptativité pour une métrique isotrope de taille $h = \frac{1}{10}$. À chaque itération, le maillage bouge peu et peut être considéré comme stationnaire. Dans un premier temps, à chaque itération, on calcule $I_h^k H_\epsilon(\phi)$ et nous effectuons une mesure de la convergence du point fixe (cf. Alauzet *et al.* (2003)) par

$$\eta_i = \frac{\|F_{h,i}(\mathcal{T}_{i+1}) - F_{h,i+1}\|_{L^2} + \|F_{h,i}(\mathcal{T}_{i+1}) - F_{h,i+1}\|_{L^2}}{2}.$$

Trois méthodes sont appliquées. La première méthode est la méthode par évaluation

Algorithme 5 Intersection d'un triangle avec un maillage

ENTRÉES: Le maillage \mathcal{T}_h , une structure de données de \mathcal{T}_h de type *ADT* et un triangle \overline{K} quelconque.

SORTIES: Le maillage de $\mathcal{T}_h \cap \overline{K}$

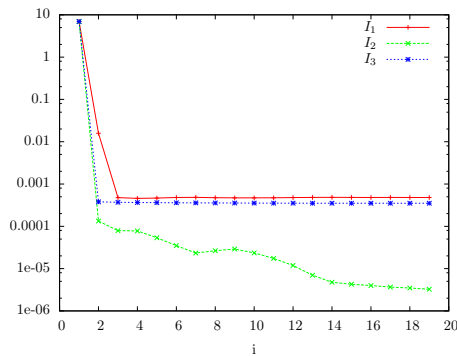
· Déterminer le recouvrement du triangle \overline{K} par intersection des boîtes englobantes (ADT)

pour tout $e_i \in \overline{K}$ **faire**

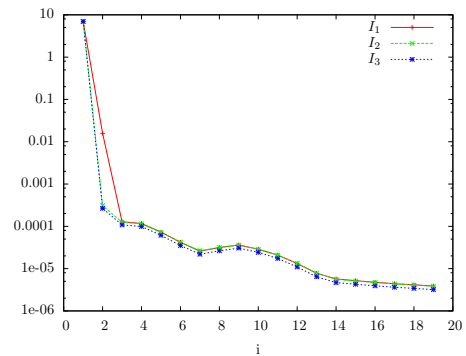
· Construire le maillage incluant la discrétisation de l'isosurface de valeur nulle de l'interpolation de la fonction distance signée à la droite portée par le vecteur e_i et passant par le *ime* sommet de K .

· Supprimer les triangles n'appartenant pas à K

fin pour



(a) Approximation modale π_h^3



(b) Approximation nodale I_h^3

Figure 4.6: Illustration la convergence du point fixe selon 3 méthodes d'interpolation, I_1 (évaluation ponctuelle), I_2 (projection locale L^2 par intersection de maillage), I_3 (projection globale L^2 par intersection de maillage)

ponctuelle (I_1), la deuxième méthode est une projection L^2 locale par élément (I_2), et la troisième méthode est une projection L^2 globale (I_3).

On approxime la pseudo-concentration avec $I_h^k H_\epsilon(\phi)$. Nous effectuons maintenant le même test en choisissant une discrétisation de la pseudo-concentration comme la projection locale $\pi_h^k H_\epsilon(\phi)$. La discrétisation appartient à l'espace W_h^k . La deuxième méthode converge. Les autres ne convergent pas. Ceci illustre l'importance d'appliquer un traitement spécifique pour interpoler les fonctions discontinues. La mé-

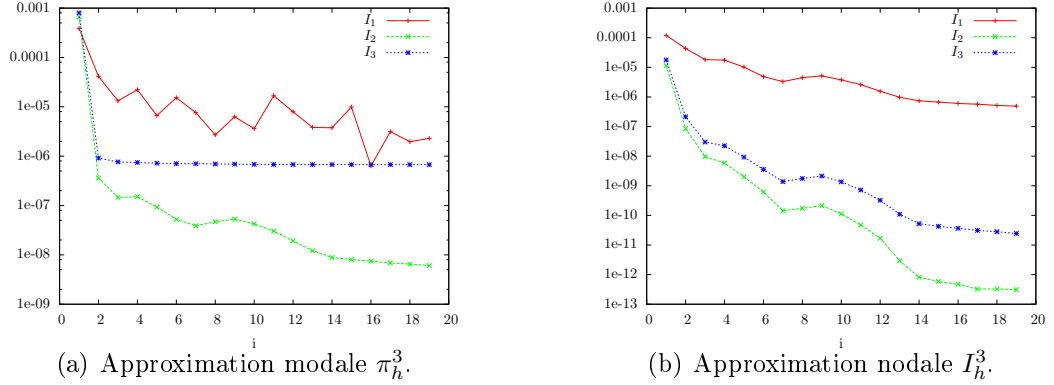


Figure 4.7: Illustration de la différence $\|F_{h,i+1}\|_2 - \|F_{h,i}\|_2$, I_1 (évaluation ponctuelle), I_2 (projection locale L^2 par intersection de maillage), I_3 (projection globale L^2 par intersection de maillage)

thode que nous proposons converge pour de telles fonctions, contrairement aux autres approches.

Nous terminons la présentation de l'interpolation entre deux maillages des variables éléments-finis par une remarque importante qui constitue une perspective future de ce travail. Lorsque les variables de l'écoulement sont interpolées, les équations ne sont plus vérifiées. Cela implique deux points importants : la contrainte d'incompressibilité n'est plus vérifiée et les conditions aux bords ne sont pas conservées si les frontières se chevauchent. La méthodologie que nous avons proposée est donc partielle. La contrainte d'incompressibilité $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ peut être facilement appliquée par l'ajout d'un multiplicateur de Lagrange à l'opérateur de projection globale au sens L^2 (comme cela est fait pour la variable de la pression). Cette formulation (de type Galerkin) nous permet également de pouvoir imposer les conditions de Dirichlet au temps correspondant. Nous jugeons que le développement d'une méthodologie fiable pour effectuer l'interpolation des variables lors d'un changement de discrétisation doit prendre en compte les équations aux dérivées partielles régissant l'écoulement étudié.

4.3.3 L'interpolation de la métrique

Comment interpoler une métrique entre deux maillages ? L'ensemble des matrices symétriques définies positives forme un ensemble convexe. Ainsi, une combinaison convexe de métriques est encore une métrique :

$$\mathbf{M} = \sum a_i \mathbf{M}_i, \quad \sum a_i = 1, \quad a_i \geq 0.$$

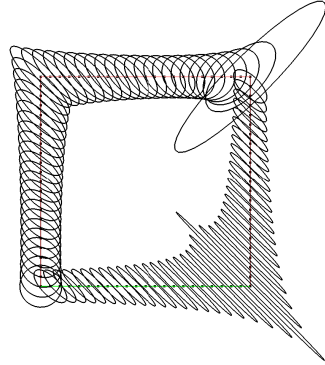
Ceci permet par exemple de définir le long d'une arête \mathbf{e} munie des extrémités \mathbf{a} et \mathbf{b} , un schéma d'interpolation qui consiste à interpoler les métriques terme à terme :

$$M(\mathbf{a} + t\mathbf{e}) = (1 - t)M(\mathbf{a}) + tM(\mathbf{b}), \quad t \in [0, 1].$$

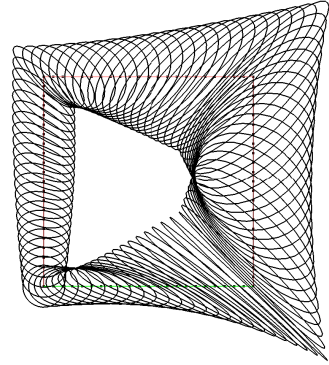
Pour ce schéma, on remarque à la figure 4.8(a) que les tailles ne sont pas interpolées linéairement. Pour y remédier, on peut par exemple utiliser

$$M(\mathbf{a} + t\mathbf{e}) = \left((1 - t)M(\mathbf{a})^{-\frac{1}{2}} + tM(\mathbf{b})^{-\frac{1}{2}} \right)^{-2}.$$

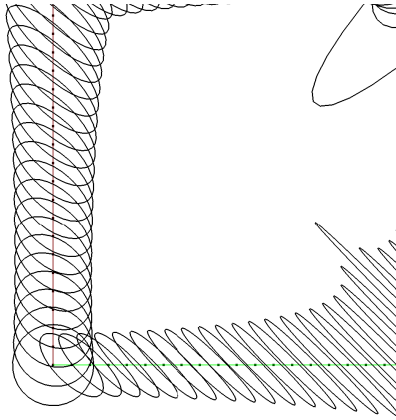
La figure 4.8(a) illustre ce dernier point où nous voyons clairement que les tailles sont mieux contrôlées. D'autres schémas sont disponibles et le lecteur peut se référer à l'ouvrage réalisé par George et Borouchaki (1997). Nous considérons que l'interpolation terme à terme n'est pas la méthode la plus judicieuse. Cependant, la librairie OORT l'utilise. Nous choisissons donc de rester cohérent vis-à-vis de cette librairie. On peut ainsi considérer que chacun des termes du tenseur métrique \mathcal{M} est une fonction éléments-finis linéaire de l'espace V_T^1 . Pour un triangle K de sommets $(\mathbf{z}_j)_{1 \leq j \leq 3}$, l'interpolation de la métrique \mathcal{M} en un point $\mathbf{P} \in K$ s'effectue



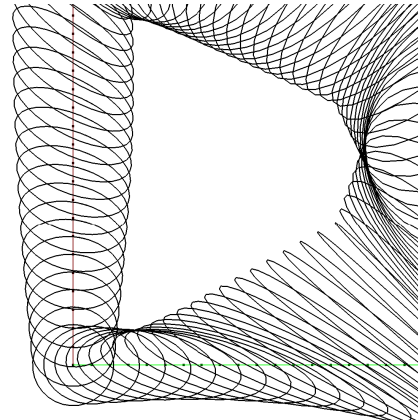
(a) Interpolation terme à terme.



(b) Interpolation sur les tailles.



(c) Agrandissement de (a).



(d) Agrandissement de (b).

Figure 4.8: Illustration de deux schémas d'interpolation de métriques le long d'une arête

à l'aide des coordonnées barycentriques $\hat{\mathcal{N}}_j(\mathbf{P})$ de \mathbf{P} :

$$\mathcal{M}(\mathbf{P}) = \sum_{j=1}^3 \hat{\mathcal{N}}_j(\mathbf{P}) \mathcal{M}(\mathbf{z}_j) = \sum_{j=1}^3 \hat{\mathcal{N}}_j(\mathbf{P}) \mathbf{M}_j.$$

La méthode d'interpolation par évaluation ponctuelle présentée précédemment convient pour effectuer l'interpolation d'une métrique entre deux maillages puisqu'elle satisfait le principe du maximum pour les fonctions linéaires. La propriété

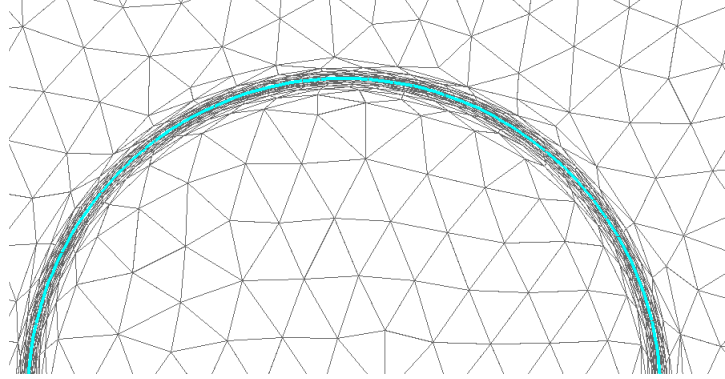


Figure 4.9: Le maillage \mathcal{T}^0 et l'interface Γ_0 définis au temps t_0 pour le problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique.

fondamentale du tenseur métrique, la positivité, est donc conservée.

4.4 L'accélération du processus d'adaptation

Nous reprenons dans cette section l'algorithme d'adaptation de maillage transitoire (Alauzet *et al.* (2007)). L'application de l'algorithme de point fixe d'adaptation de maillage se concentre sur un intervalle de temps $\Delta_i = [t_0, t_1]$, où n solutions sont calculées aux temps $t_i = \frac{t_1 - t_0}{n}$ (cf. équation (1.80)) :

$$(\mathcal{S}_{j+1}^0, \mathcal{S}_{j+1}^1, \mathcal{T}_{j+1}^{\Delta_i}) = \mathcal{G}(\mathcal{S}_j^0, \mathcal{S}_j^1, \mathcal{T}_j^{\Delta_i}). \quad (4.10)$$

L'indice j correspond à l'itération j du point fixe d'adaptation et nous avons noté \mathcal{S}_j^i la solution discrète définie au temps t_i .

En prenant l'exemple du problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique (le maillage \mathcal{T}_0 et la variable eulérienne $F^0 = F_h(\mathbf{x}, t_0)$ sont illustrés à la figure 4.9), nous détaillons le contenu de la fonction de point fixe \mathcal{G} par l'algorithme 6. Cette boucle d'adaptation permet de générer le maillage

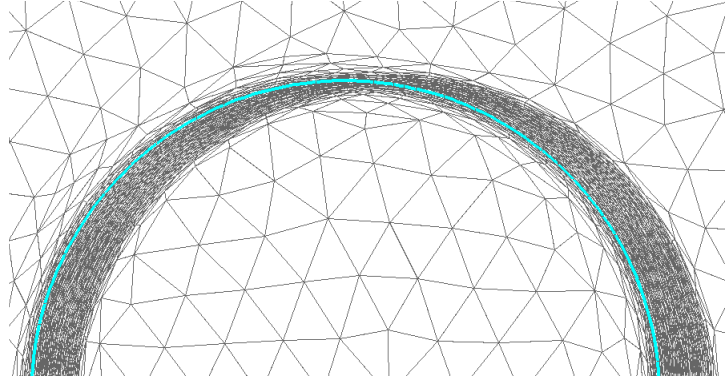


Figure 4.10: Le maillage \mathcal{T}^Δ et l'interface Γ_0 définis au temps t_0 pour le problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique.

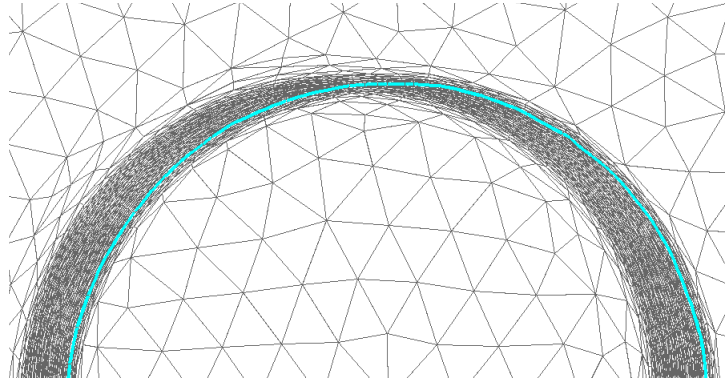


Figure 4.11: Le maillage \mathcal{T}^Δ et l'interface Γ_1 définis au temps t_1 pour le problème d'une bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique.

\mathcal{T}^{Δ_i} avec une résolution fine sur la zone où la surface libre évolue. Ce maillage est illustré aux figures 4.10 et 4.11, où sont aussi illustrées les interfaces aux temps t_0 et t_1 . À partir de l'intervalle de temps Δ_i , on se concentre sur les premières itérations de l'algorithme de point fixe transitoire pour le prochain intervalle de temps Δ_{i+1} . Lorsque l'algorithme d'adaptation de maillage a convergé pour l'intervalle de temps Δ_i , nous obtenons un maillage adapté de la première solution de l'intervalle jusqu'à la dernière solution \mathcal{S}^n (cf. figure 4.11). Lors de la prochaine période de temps Δ_{i+1} , la surface libre va évoluer vers une région où la résolution du maillage est

Algorithme 6 La fonction de point-fixe \mathcal{G} pour l'adaptation de maillage transitoire

ENTRÉES: Le maillage $\mathcal{T}_j^{\Delta_i}$, les solutions $\mathcal{S}^0 = (F_h(t_0), \mathbf{u}_h(t_0))_j$ et la métrique $\mathcal{M}^0 = \mathcal{M}(\mathbf{x}, t_0)$.

SORTIES: Le maillage $\mathcal{T}_{j+1}^{\Delta_i}$, la métrique $\mathcal{M}_{j+1}^{\Delta_i}$, la solution $\mathcal{S}_{j+1}^1 = (F_h(t_1), \mathbf{u}_h(t_1))_{j+1}$ et la métrique $\mathcal{M}_{j+1}^1 = \mathcal{M}(\mathbf{x}, t_1)$

- Construire le maillage $\mathcal{T}_{j+1}(\mathcal{M}_j^{\Delta_i})$
- Interpoler la condition initiale $\mathcal{S}_{j+1}^0 = T(\mathcal{S}^0, \mathcal{T}_{j+1})$
- Interpoler la métrique initiale $\mathcal{M}_{j+1}^0 = T(\mathcal{M}^0, \mathcal{T}_{j+1})$

pour tout $i=1, \dots, n$ **faire**

- Calculer la solution $\mathcal{S}_{j+1}^i(\mathcal{S}_{j+1}^{i-1})$
- Calculer la métrique ponctuelle \mathcal{M}_{j+1}^i

fin pour

- Calculer la métrique de l'intervalle $\mathcal{M}_{j+1}^{\Delta_i} = \cap_{i=0}^n \mathcal{M}_{j+1}^i$
 - Calculer la métrique pour les $k + 1$ dernières solutions de l'intervalle $\mathcal{M}_{j+1}^1 = \cap_{i=n-k}^n \mathcal{M}_{j+1}^i$
-

faible. Cela implique le coût de quelques itérations pour capturer avec précision la dynamique de la surface libre sur l'intervalle de temps Δ_{i+1} . Le temps d'exécution de chaque itération de l'algorithme d'adaptation transitoire est important puisque la résolution des équations régissant l'écoulement s'effectue de façon couplée. Notre objectif est donc de réduire le nombre d'itérations par l'introduction d'un prédicteur en espace. Le rôle de ce prédicteur est de fournir une approximation a priori de la métrique $\mathcal{M}^{\Delta_{i+1}}$. Pour atteindre cet objectif, nous proposons l'utilisation d'un deuxième point fixe adaptatif dans le but de capturer le transport (inexact) de l'interface sur la prochaine période de temps. Le transport de l'interface s'effectue uniquement par la résolution de l'équation de transport à l'aide du champ de vitesse \mathbf{u}^n défini au temps t_n de la période Δ_i . La résolution de cette équation s'effectue à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue.

4.4.1 Le prédicteur en espace

Le prédicteur en espace est basé sur l'équation de transport. L'objectif est d'obtenir une estimation de l'évolution de la surface libre pour adapter le maillage a priori, i.e. avant de résoudre l'ensemble des équations sur l'intervalle de temps considéré. Pour cela, on choisit de résoudre uniquement l'équation de transport avec un champ de vitesse invariant en temps :

$$\frac{\partial F(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0) \cdot \nabla F(\mathbf{x}, t) = 0, \quad t > t_0.$$

La discrétisation s'effectue à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue. À l'aide d'un schéma d'Euler implicite, la résolution élément par élément s'écrit

$$\begin{aligned} \sum_{K \in T_h} \int_K (F_h^n + \Delta t \mathbf{u}^0 \cdot \nabla F_h^n) v_h dK + \Delta t \sum_{e \in \partial \Omega_h} \int_e |\mathbf{u}^0 \cdot \mathbf{n}| [F_h^n] v_h ds \\ = \Delta t \sum_{e \in \partial \Omega^-} \int_e |\mathbf{u}^0 \cdot \mathbf{n}| g^n v_h ds + \int_K F_h^{n-1} v_h dK, \end{aligned} \quad (4.11)$$

où $[F_h] = F_h^+ - F_h^-$ est le saut de la variable sur une arête et $g^n = g(\mathbf{x}, t_n)$ est la condition de Dirichlet.

La résolution de cette équation permet d'avoir une approximation de l'évolution de l'interface pour la prochaine période de temps. À partir de ces informations, une unique métrique est construite à l'aide des métriques calculées à chaque pas de temps et de la méthode d'intersection que nous avons décrite dans ce chapitre :

$$\mathcal{M}_p = \mathcal{M}_0 \cap \left(\bigcap_{j=1}^n \mathcal{M}_j(F_h^j) \right).$$

La modification de l'algorithme de point-fixe est illustrée à la figure 4.12. En prenant l'exemple du problème du « vortex-in-box », nous illustrons le maillage et l'interface

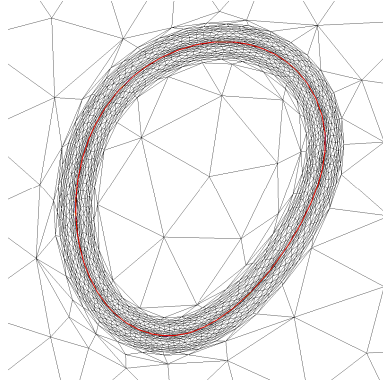


Figure 4.13: Maillage \mathcal{T}^0 sans prédiction en espace pour le problème du « vortex-in-box »

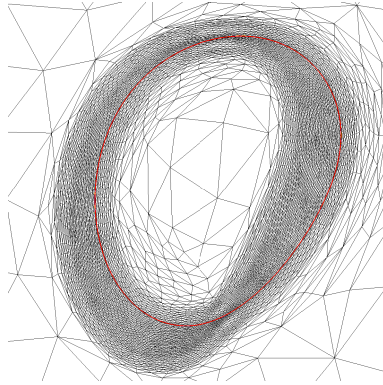


Figure 4.14: Maillage \mathcal{T}^0 avec prédiction en espace sur la prochaine période de temps pour le problème du « vortex-in-box »

à un instant t obtenus avec la boucle d'adaptativité sans l'utilisation de notre prédicteur à la figure 4.13. La figure 4.14 illustre l'application du prédicteur, où nous voyons que le maillage est bien adapté sur la région où la surface libre va évoluer sur la prochaine période de temps. À titre d'illustration, on réduit l'intervalle de temps au calcul de deux pas de temps :

$$(u_{j+1}^1, F_{j+1}^1, u_{j+1}^2, F_{j+1}^2, \mathcal{T}_{j+1}) = \mathcal{G}(\mathcal{T}_j, u_j^0, F_j^0), \quad (4.12)$$

où \mathcal{T}_{j+1} est le maillage adapté pour l'ensemble des solutions définies sur l'intervalle

de temps. L'insertion de notre prédicteur se traduit par l'ajout d'une deuxième fonction de point-fixe

$$(\overline{F}_{j+1}^1, \overline{F}_{j+1}^2, \overline{\mathcal{T}}_{j+1}) = \mathcal{G}_p(\mathcal{T}_j, u_j^0, F_j^0), \quad (4.13)$$

afin de modifier la fonction de point-fixe initiale :

$$(u_{j+1}^1, F_{j+1}^1, u_{j+1}^2, F_{j+1}^2, \mathcal{T}_{j+1}) = \mathcal{G}(\overline{\mathcal{T}}_{j+1}, u_j^0, F_j^0). \quad (4.14)$$

Les figures 4.15, 4.16 et 4.17 illustrent la convergence du point fixe en fonction des itérations, pour les normes L^1 , L^2 et L^∞ , et les figures 4.18, 4.19 et 4.20 illustrent les mêmes quantités mais cette fois en fonction du temps. L'approche que nous avons proposée se comporte comme prévu. Nous voyons qu'il n'est pas nécessaire d'effectuer un nombre important d'itérations de la boucle d'adaptation de maillage. Deux ou trois itérations sont suffisantes car les itérations suivantes n'améliorent pas la convergence. L'efficacité de notre prédicteur se manifeste dans la convergence du point fixe d'adaptation, où nous voyons que nous pouvons réduire la boucle principale d'adaptation à une seule itération. La perspective en laquelle nous croyons est d'effectuer au plus deux itérations de calculs par période de temps, la première permettant de corriger le maillage fourni par le prédicteur et la seconde permettant de calculer les solutions définitives.

4.4.2 Le prédicteur en temps

L'algorithme d'adaptation est complété par une adaptation en temps. Nous utilisons la méthodologie proposée par Malidi *et al.* (2000) qui permet d'ajuster judicieusement le pas de temps lorsque le schéma de Gear est appliqué. Ceci est l'élément de la méthodologie d'adaptativité qui permet d'améliorer la robustesse de la

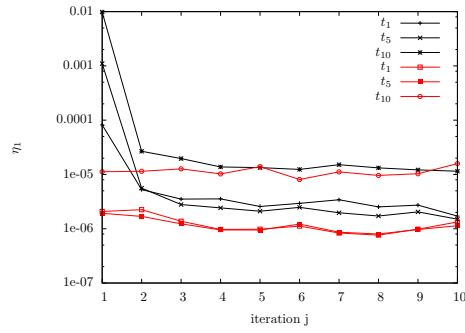


Figure 4.15: Mesure du point fixe en norme L^1 en fonction des itérations pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique

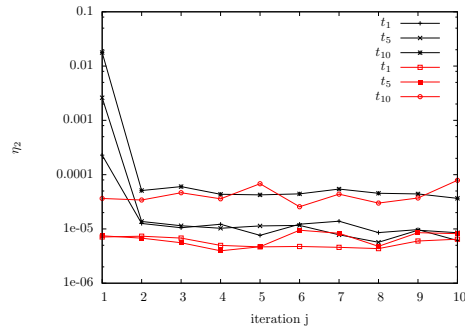


Figure 4.16: Mesure du point fixe en norme L^2 en fonction des itérations pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique

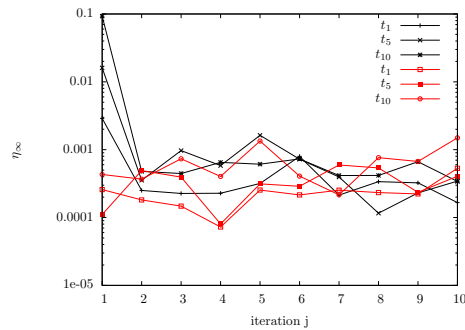


Figure 4.17: Mesure du point fixe en norme L^∞ en fonction des itérations pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique

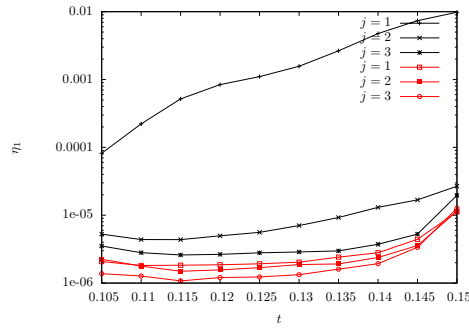


Figure 4.18: Mesure du point fixe en norme L^1 en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique

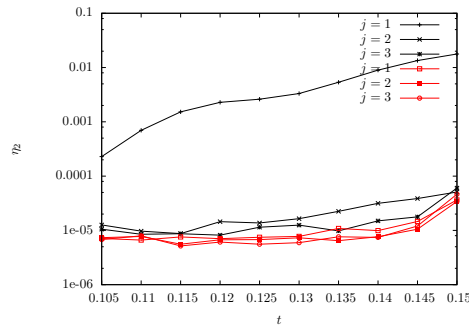


Figure 4.19: Mesure du point fixe en norme L^2 en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique

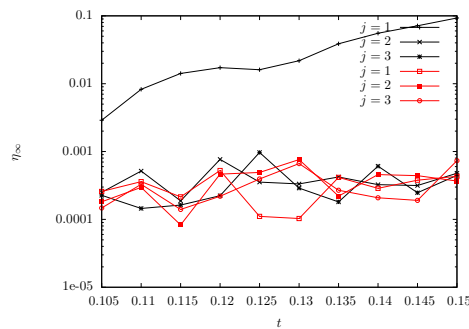


Figure 4.20: Mesure du point fixe en norme L^∞ en fonction du temps pour le problème de la bulle soumise à la poussée d'Archimède dans un repère axisymétrique

résolution numérique par le contrôle de l'erreur de troncature. Les changements de topologie s'effectuent le plus souvent sur des intervalles de temps très courts. Un pas de temps inadéquat mènera soit à la divergence des algorithmes, soit à une dispersion et une dissipation importantes du phénomène, i.e. une suppression des phénomènes présents à la plus petite échelle.

Les perspectives de travaux futurs consistent en des expériences numériques quantitatives pour mesurer le bénéfice de l'adaptation en temps. Nous avons effectué des expériences numériques sur deux problèmes. Le premier problème est celui de l'advection d'une bulle suivant un champ de vitesse constant. Le pas de temps déterminé par le prédicteur proposé devient constant, ce qui montre la cohérence de la méthodologie. Nous avons aussi confronté l'adaptation en temps sur le problème du « vortex-in-box », où nous avons constaté un impact positif sur la conservation de la quantité de volume.

4.5 Quelques illustrations de problèmes à surface libre

Cette section présente un ensemble d'illustrations de problèmes d'écoulements incluant une surface libre. Les deux premiers problèmes abordés sont des problèmes de vérification de la résolution des équations ainsi que de la méthodologie de ré-initialisation de la pseudo-concentration. Le calcul de la force capillaire volumique n'est pas inclus. La tension superficielle est prise en compte dans les trois problèmes qui suivent.

4.5.1 Le problème de la rupture d'une colonne d'eau

Le problème de rupture d'une colonne d'eau est un problème à surface libre sans tension superficielle. Plusieurs versions de ce problème sont étudiés (Marchandise (2006)). Le domaine Ω est le rectangle $[0; 4, 5] \times [0; 1, 5]$. Le ratio de densité est donné par $\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{1000}$ et le ratio de viscosité est donné par $\frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{1}{100}$. Nous avons fixé le nombre de Froude à $Fr = 0,05$ et le nombre de Reynolds est donné par $Re = 100$. La principale difficulté de ce problème est l'imposition des conditions aux bords. Physiquement, les conditions appliquées sur le champ de vitesse sur la partie du bord qui coïncide avec le sol sont des conditions de Dirichlet nulles. Imposer ces conditions pose des problèmes de convergence. L'imposition de conditions de glissement sur cette partie de la frontière est une « astuce » numérique qui permet de régler ce problème puisque ces conditions ne conduisent pas à une bonne modélisation la physique. La figure 4.21 illustre la surface libre obtenue avec la simulation numérique de ce problème pour différents instants à partir de $t_0 = 0$ (de gauche à droite et de haut en bas). La surface libre au temps $t_0 = 0$ est définie par l'axe $x = 2$. Le fluide dont la densité est la plus importante est situé à droite, et la force de gravitation est orientée vers le bas. Nous avons utilisé la méthodologie d'adaptation de maillage décrite dans ce chapitre, ainsi que la méthodologie de réinitialisation de la pseudo-concentration présentée au chapitre précédent. L'utilisation d'un nombre de Reynolds plus élevé ($O(10^3)$) présente des problèmes de convergence qui peuvent, selon notre expérience, partiellement se résoudre grâce à l'utilisation des méthodes stabilisées pour la discrétisation des équation en vitesse/pression (cf. chapitre 1).

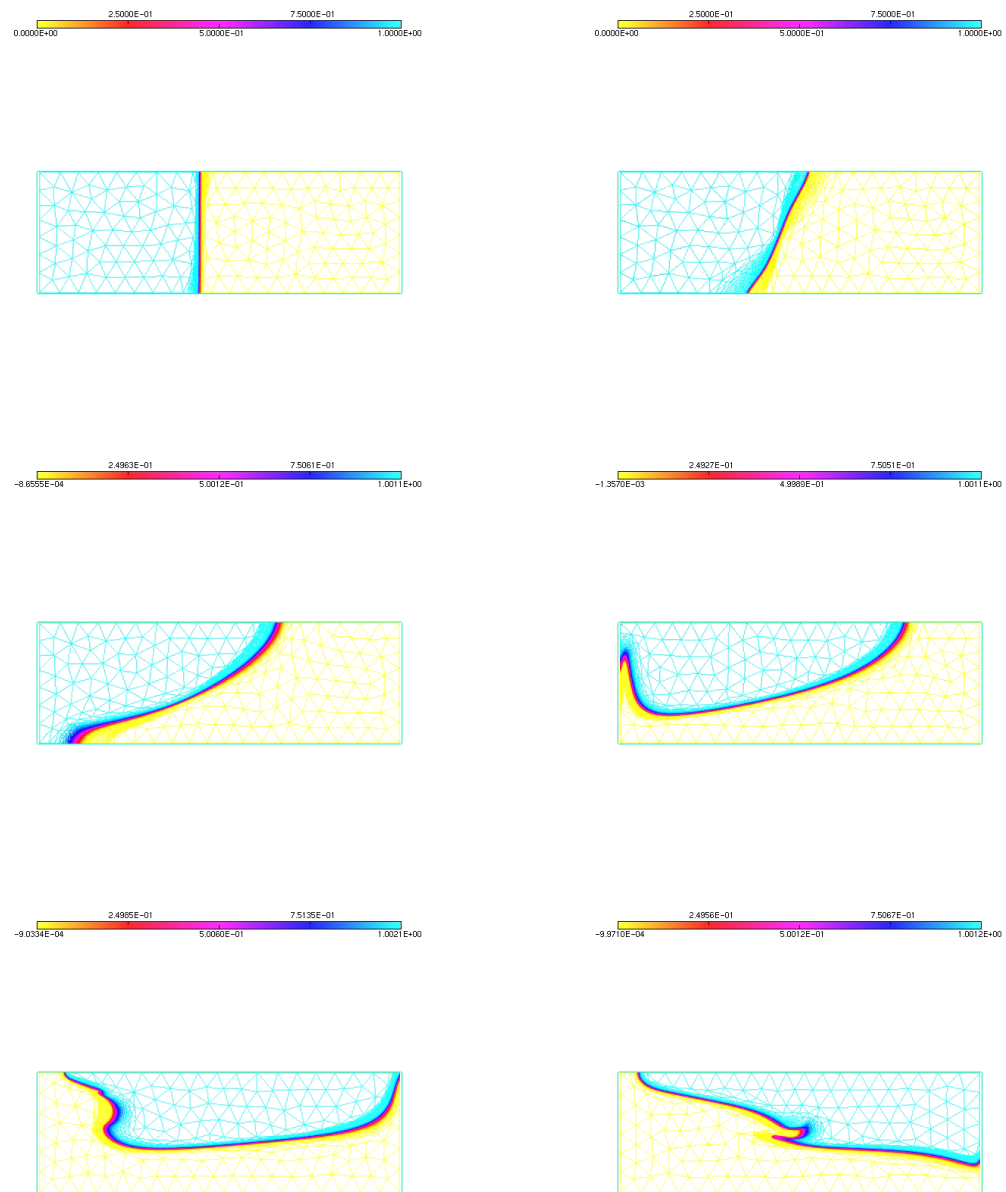


Figure 4.21: Illustration qualitative du problème de la rupture d'une colonne d'eau. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)

4.5.2 L'instabilité de Rayleigh-Taylor

Le problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est un problème sans tension superficielle. Un fluide est placé sous un autre fluide possédant une densité plus importante et de telle sorte que la surface libre ne soit pas exactement horizontale. Il s'agit d'un problème transitoire qui converge vers une situation d'équilibre, i.e. une surface libre horizontale séparant le fluide de faible densité au-dessus du fluide dont la densité est la plus importante. Non seulement atteindre la situation d'équilibre est difficile mais, de plus, les fluides évoluent sous la forme de filaments, c'est-à-dire que de nombreux changements de topologie ont lieu (à titre d'illustration, la dispersion de la fumée dans l'air est un exemple du phénomène d'instabilité de Rayleigh-Taylor). C'est un bon problème de vérification de la conservation des quantités de fluides avec l'utilisation de la méthodologie de réinitialisation de la pseudo-concentration et de plus, celui-ci n'implique pas le calcul numérique de la force capillaire volumique.

Le domaine Ω est le rectangle $[0; 1] \times [0; 4]$. Le ratio de densité est donné par $\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{2}$ et le ratio de viscosité est donné par $\frac{\mu_1}{\mu_2} = 1$. Nous avons fixé le nombre de Froude à $Fr = 0,05$ et le nombre de Reynolds est donné par $Re = 500$. Le pas de temps a été fixé à $\frac{1}{1000}$. La figure 4.22 illustre la région de transition obtenue avec la simulation numérique de ce phénomène pour différents instants $t > 0$. La figure 4.23 illustre le même problème mais en utilisant les coordonnées axisymétriques et pour des instants différents de ceux utilisés à la figure 4.22.

Ce problème représente toujours un défi pour notre méthodologie numérique puisqu'il s'agit d'un problème où l'interface évolue de telle sorte que la distance de celle-ci à l'axe médian devient plus petite que la résolution du maillage. En effet, la dernière illustration de la figure 4.22 présente des endroits où la région de tran-

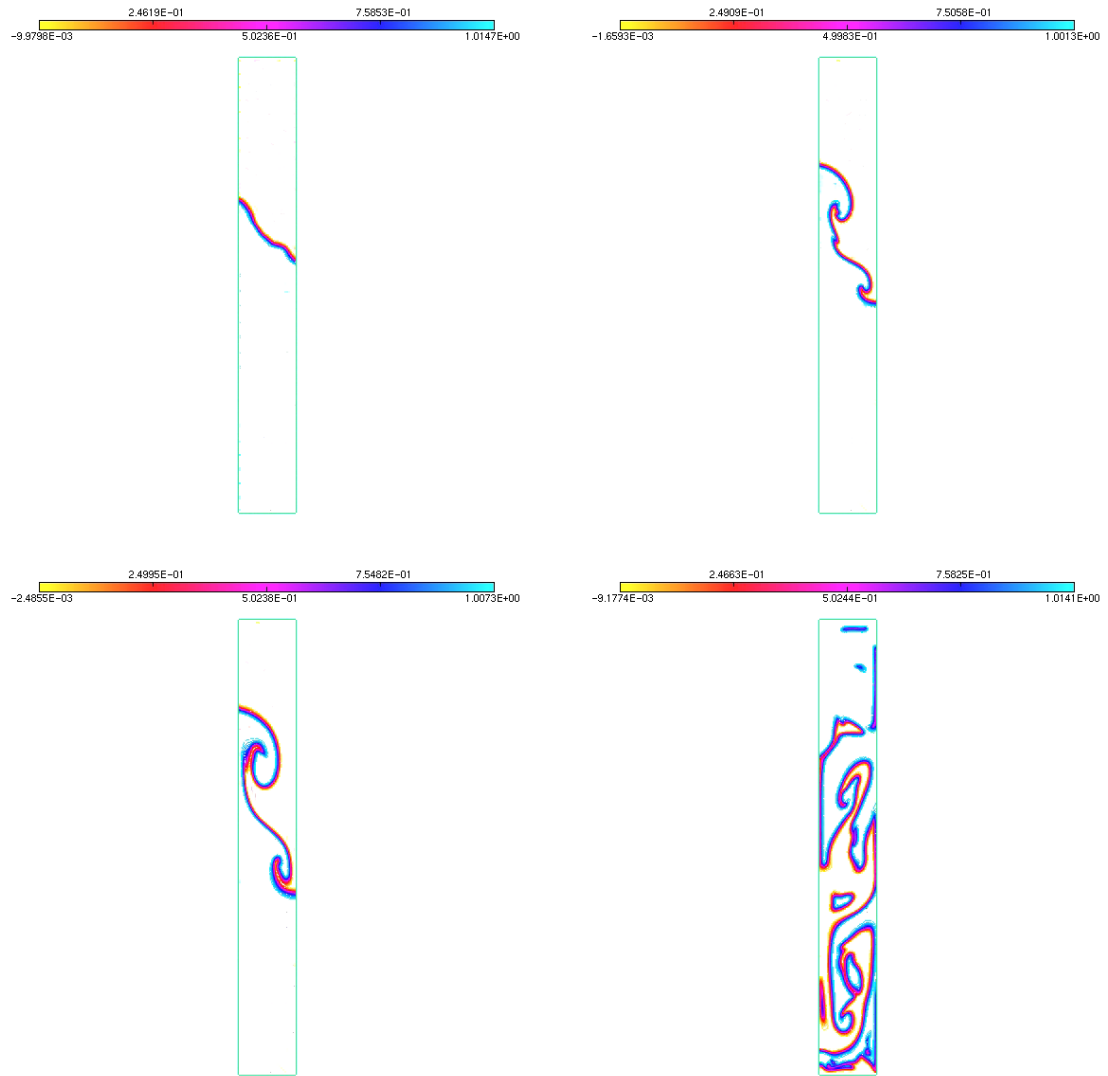


Figure 4.22: Illustration du problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en 2D.
L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)

sition n'est pas complète. Dans ce cas, non seulement la conservation précise de la quantité de fluide est difficile mais la modélisation de la surface par une courbe de niveau montre aussi ses limites. C'est une question importante sur laquelle il faut s'interroger dans la suite logique des travaux présentés dans cette thèse.

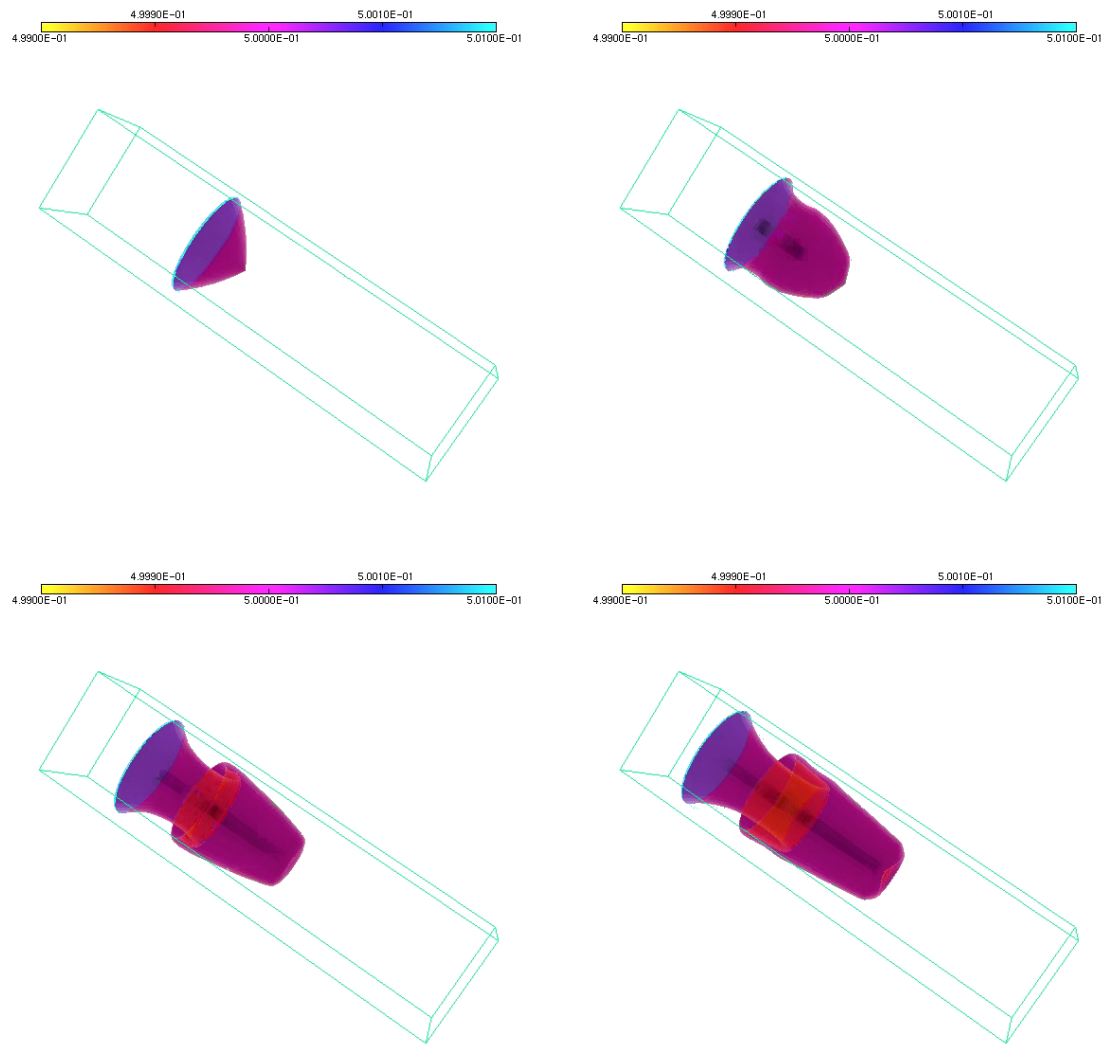


Figure 4.23: Illustration du problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor en coordonnées axisymétriques. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)

4.5.3 Une variante du problème de Laplace

Tel que vu au chapitre 2, il s'agit d'un problème qui converge vers une situation d'équilibre. La force capillaire volumique est incluse dans les équations mais la force

de gravité est négligée en fixant le nombre de Froude, $Fr = \infty$. Une entité de fluide est placée dans un autre fluide et quelque soit la forme de la surface libre, l'évolution de celle-ci converge vers une interface dont la courbure est constante. Cette convergence s'accompagne d'un amortissement dont le terme visqueux est responsable. Plus le nombre de Reynolds est faible et plus la convergence sera rapide. Inversement, pour un nombre de Reynolds élevé, la convergence n'est pas monotone. C'est un bon problème de vérification du calcul numérique de la force capillaire volumique.

Le domaine est le carré $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}] \times [-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$. L'interface initiale est définie par un carré centré à l'origine et dont la longueur du côté est donnée par $\frac{1}{4}$. La forme initiale de l'interface ajoute une difficulté supplémentaire pour calculer numériquement la force capillaire volumique puisque la courbure est discontinue. Nous utilisons un faible nombre de Reynolds, $Re = 40$, et un nombre de Weber, $We = \frac{1}{25}$. La viscosité des fluides est identique ($\frac{\mu_1}{\mu_2} = 1$) alors que le ratio de densité est donné par $\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{100}$. Le pas de temps est donné par $\frac{1}{4000}$. La figure 4.24 illustre, pour différents instants, la région de transition de la pseudo-concentration et la norme du champ de vitesse (à droite). Les résultats numériques correspondent à nos attentes. Nous atteignons en effet la situation d'équilibre, i.e. l'interface finale est un cercle.

4.5.4 Deux bulles soumises à la poussée d'Archimède

Le problème de deux bulles soumises à la poussée d'Archimède est un problème qui inclut la force capillaire volumique. Plusieurs versions de ce problème sont étudiées (Malidi *et al.* (2000)). Le domaine Ω est le rectangle $[0; 3] \times [0; 6]$. Le ratio de densité est donné par $\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{1000}$ et le ratio de viscosité est donné par $\frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{1}{100}$. Nous avons fixé le nombre de Froude à $Fr = 0,96$, le nombre de Reynolds est donné par $Re = 464$ et le nombre de Weber est $We = 1$. La principale difficulté de ce

problème est le changement de topologie. La figure 4.25 illustre le maillage et la surface libre obtenue avec la simulation numérique de ce problème pour différents instants à partir de $t_0 = 0$. Au temps $t_0 = 0$, une première bulle de gaz de rayon $\frac{1}{2}$ est placée au point $\mathbf{c} = (2, 2; 1, 5)$ et une deuxième bulle de ce même gaz et de même rayon est placée au point $\mathbf{c} = (0, 8; 1, 5)$. Le phénomène physique correspond à la remontée de ces deux bulles de gaz suivie de la coalescence de celles-ci pour n'en former plus qu'une seule. Les résultats numériques correspondent à nos attentes, le changement de topologie est présent.

4.5.5 Le problème d'une gouttelette dans un écoulement cisailé

Ce problème (cf. Béliveau *et al.* (1998)) est un problème qui inclut la force capillaire volumique et qui néglige la force de gravitation. Un fluide est placé entre deux plaques qui coulissent dans une direction donnée mais en sens opposé. Les conditions de Dirichlet sont non nulles sur ces parois. Un fluide est immergé dans un autre fluide. La surface libre initiale est un cercle qui se déforme par la suite en une forme ellipsoïdale. Le domaine Ω est le rectangle $[0; 2] \times [0; 1]$. Le ratio de densité est donné par $\frac{\rho_1}{\rho_2} = 1$ et le ratio de viscosité est donné par $\frac{\mu_1}{\mu_2} = 1$. Nous avons fixé le nombre de Froude à $Fr = \infty$, le nombre de Reynolds est donné par $Re = 1$ et le nombre de Weber est $We = 10$. Le pas de temps a été fixé à $\Delta t = \frac{1}{100}$. La principale difficulté de ce problème est le changement de topologie. La figure 4.26 illustre le maillage. Le champ de vitesse et la surface libre obtenus avec la simulation numérique de ce problème pour différents instants à partir de $t_0 = 0$. Les résultats numériques correspondent à nos attentes, i.e. la gouttelette se déforme jusqu'à l'atteinte d'un état stationnaire.

4.5.6 La chute d'une gouttelette

Ce problème est transitoire et inclut la gravité et la force capillaire volumique. Deux fluides partagent le domaine. Le fluide dont la densité est la plus importante est situé en bas du domaine, et une gouttelette de celui-ci est immergée dans l'autre fluide. Le phénomène physique correspond à la chute de la goutte (soumise à la force de gravité) suivi du phénomène de coalescence avant d'atteindre une situation d'équilibre. Le domaine choisi est le rectangle $[0; 2] \times [0; 1]$. Le ratio de densité est donné par $\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{1000}$ et le ratio de viscosité est donné par $\frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{1}{100}$. Nous avons fixé le nombre de Froude à $Fr = \frac{5}{100}$, le nombre de Reynolds est donné par $Re = 100$ et le nombre de Weber est $We = 1$. Le pas de temps a été fixé à $\Delta t = \frac{1}{100}$. Les figures 4.27 et 4.28 illustrent les résultats numériques pour différents instants t . Chaque illustration contient (de gauche à droite) le maillage, le champ de vitesse et l'interface.

4.6 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de proposer une méthodologie d'adaptation de maillage transitoire pour les problèmes à surface libre. Nous nous sommes basés sur des triangulations anisotropes construites à l'aide d'une carte de métrique. La carte de métrique est un outil complet (lissage, intersection) pour gouverner les algorithmes d'adaptation de maillage. Bien que toutes les caractéristiques d'un maillage ne peuvent pas être spécifiées à l'aide d'une carte de métrique, cette information est suffisante pour développer une méthodologie d'adaptation. Nous avons proposé une métrique, basée sur les informations géométriques de la surface libre, permettant de contrôler l'erreur d'interpolation de la discrétisation de la pseudo-concentration.

L'interpolation entre deux maillages est une étape indispensable pour appliquer la boucle d'adaptation transitoire, et c'est également une étape délicate car les variables interpolées ne vérifient plus le système d'équations de l'écoulement. Nous avons proposé une méthodologie qui permet d'interpoler convenablement les variables continues et discontinues. La méthode d'intersection de maillage que nous avons développée s'appuie sur la méthodologie de discrétisation de la surface libre (vue au chapitre 2). Pour une variable linéaire, cette méthode ne vérifie pas le principe du maximum mais elle est conservative dans l'espace L^2 , par opposition à la méthode par évaluation ponctuelle. Pour vérifier le principe du maximum, la méthode proposée par Alauzet et Mehrenberger (2010) consiste à interpoler aussi le gradient de la variable et appliquer une série de limiteurs. Une perspective plus robuste, mais coûteuse, pourrait être d'imposer des contraintes d'inégalités sur les extremums de la variable à interpoler, notamment grâce à l'application d'un algorithme du lagrangien augmenté.

Nous avons complété la boucle d'adaptation transitoire par un prédicteur en espace afin de rendre cet algorithme plus efficace pour les problèmes à surface libre. Ce prédicteur permet de capturer a priori la dynamique de l'interface pour effectuer une pré-adaptation du maillage grâce à l'application d'une seconde boucle d'adaptation mais qui possède l'avantage d'être beaucoup moins coûteuse. C'est une méthode de prédiction/correction. D'abord le maillage est adapté selon une approximation inexacte de l'évolution de l'interface. La densité de ce maillage permet ensuite de calculer précisément la métrique basée sur la résolution du système d'équations régissant l'écoulement. La méthodologie proposée est simple, puisqu'il suffit d'appliquer le même algorithme d'adaptation de maillage avec la résolution d'une équation simplifiée. Aucune modification n'est nécessaire.

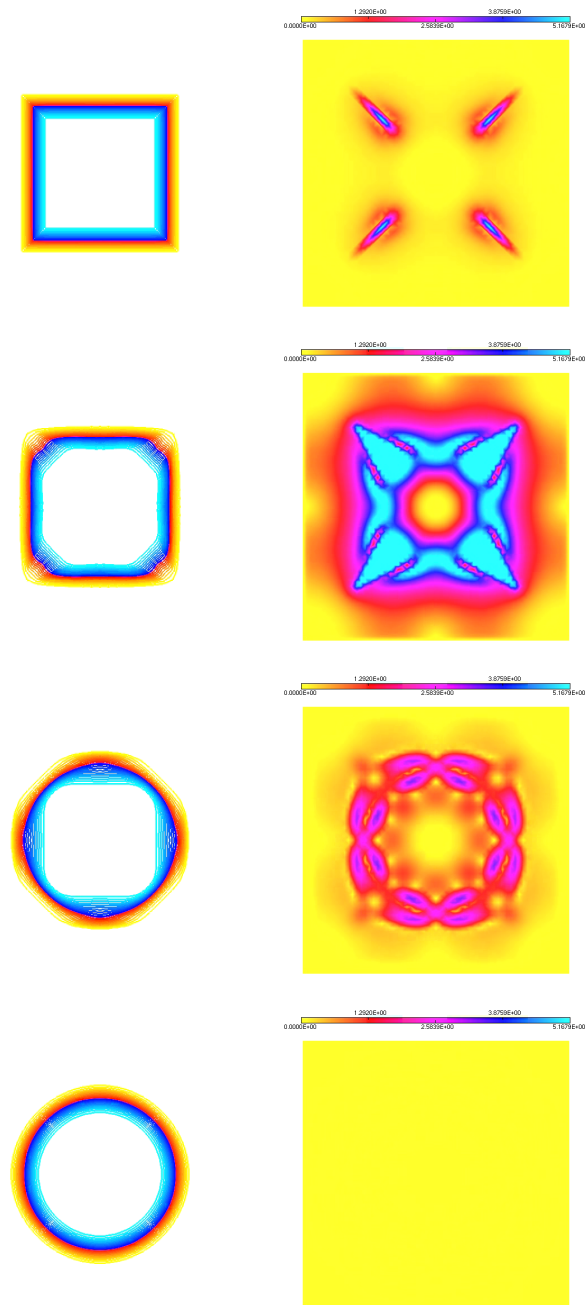


Figure 4.24: Illustration du problème de Laplace en partant d'un carré à différents instants (de haut en bas). La zone de transition de la pseudo-concentration est représentée à gauche et la norme du champ de vitesse est représentée à droite.

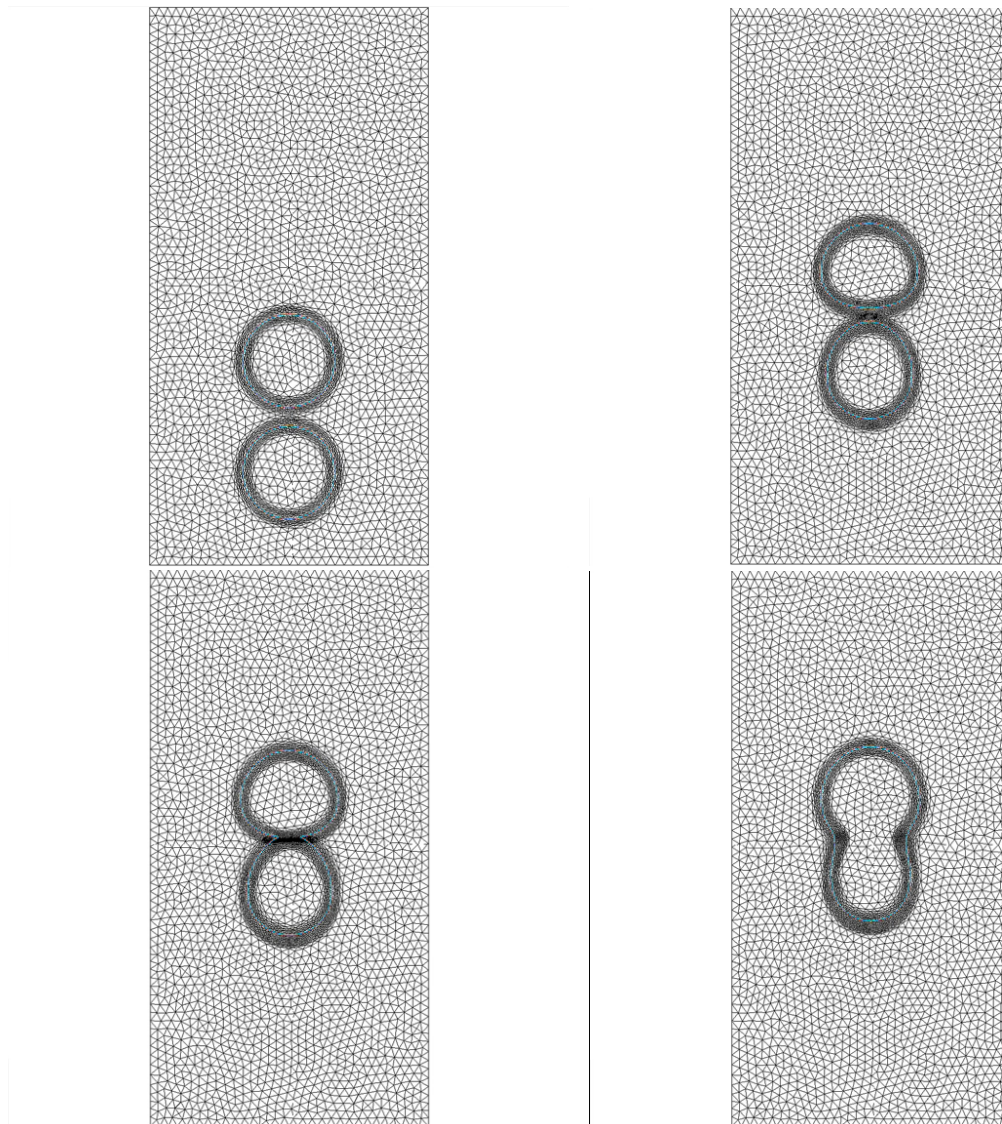


Figure 4.25: Illustration du problème de deux bulles de gaz dans un liquide soumises à la poussée d'Archimède. L'interface est représentée à différents instants (de gauche à droite et de haut en bas)

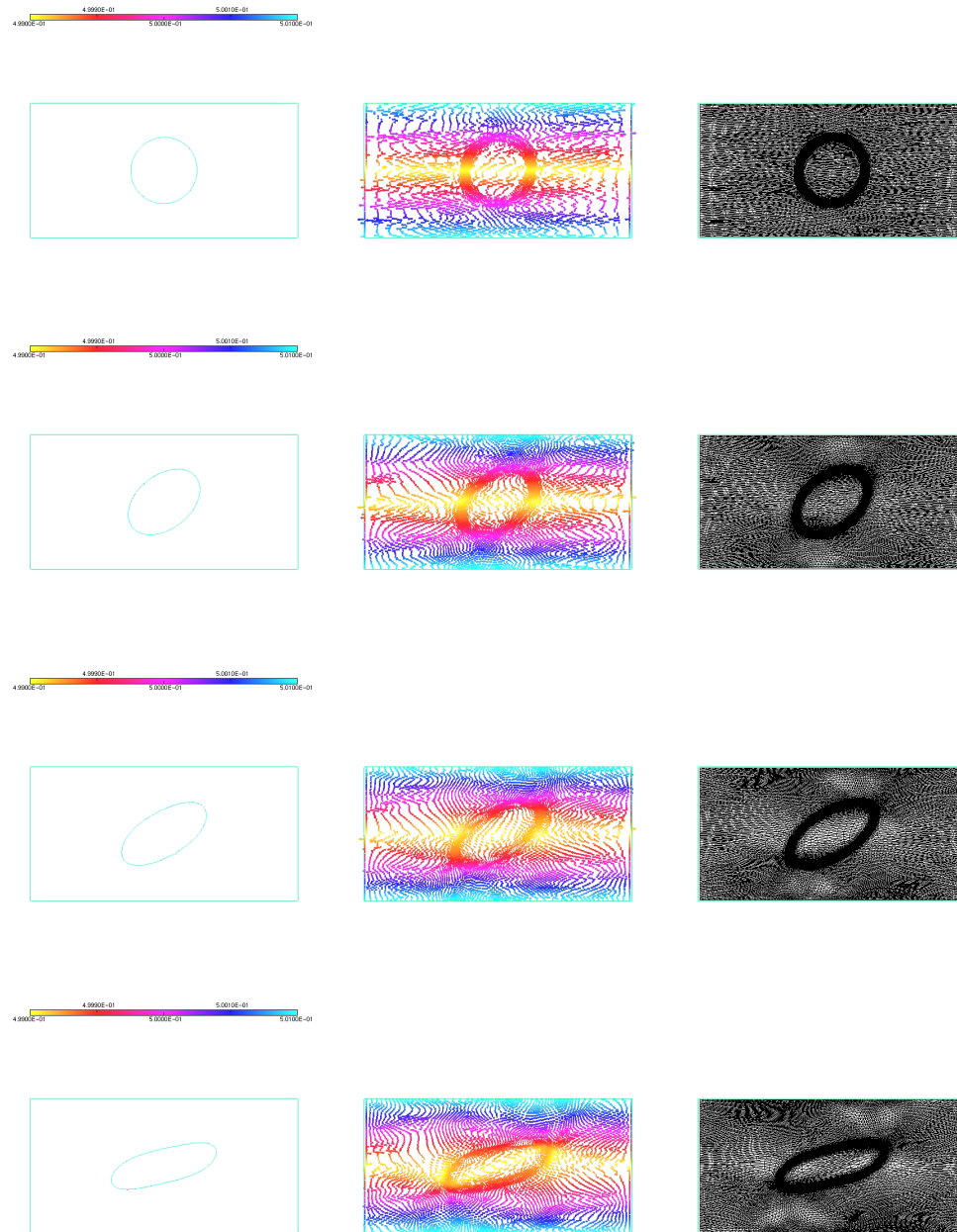


Figure 4.26: Illustration du problème d'une gouttelette dans un écoulement cisailé.
L'interface est représentée à différents instants (de haut en bas)

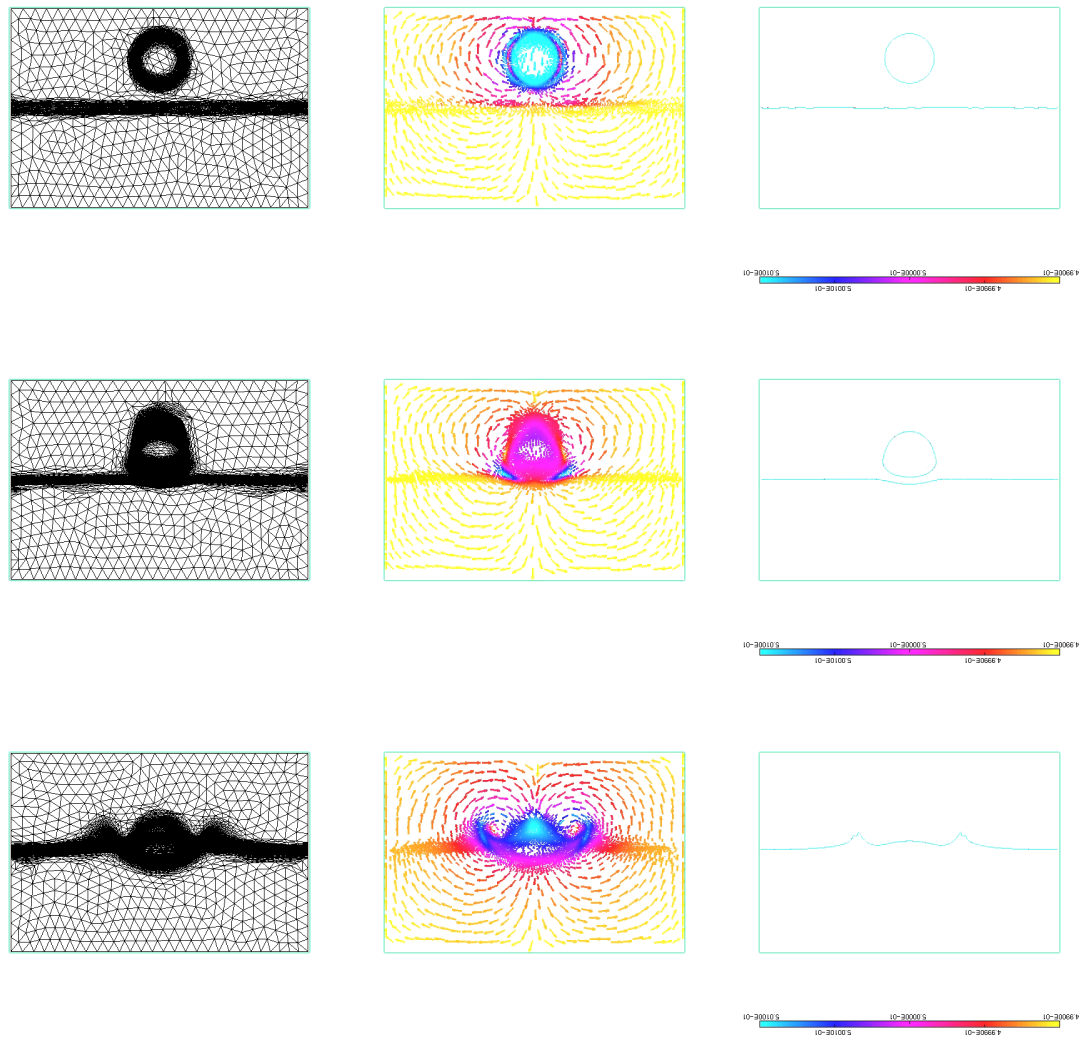


Figure 4.27: Illustration du problème de la chute d'une gouttelette dans un autre liquide. Chaque figure affiche (de gauche à droite) le maillage, le champ de vitesse et l'interface pour différents instants t (de haut en bas).

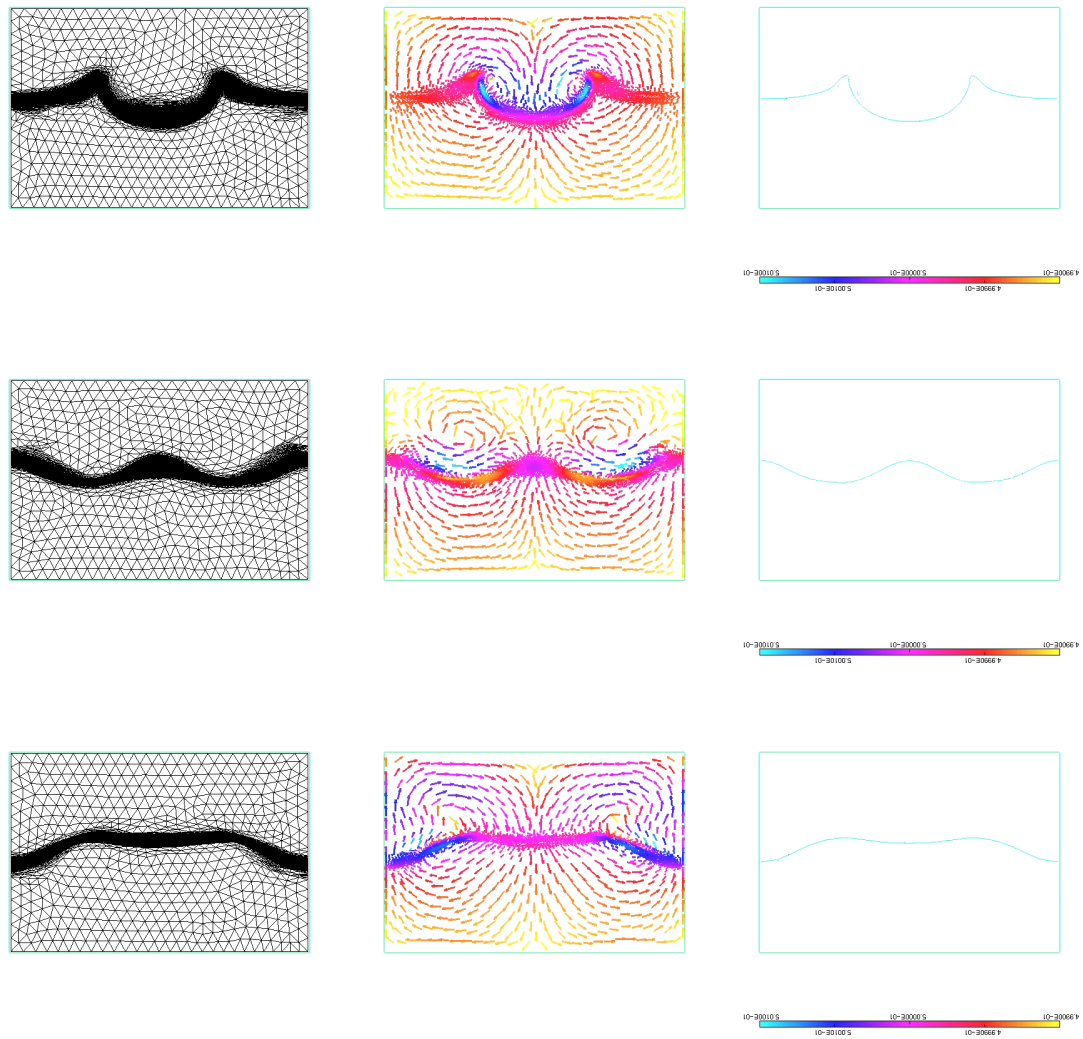


Figure 4.28: Illustration du problème de la chute d'une gouttelette dans un autre liquide. Chaque figure affiche (de gauche à droite) le maillage, le champ de vitesse et l'interface pour différents instants t (de haut en bas).

CONCLUSION

L'objectif de cette thèse était de développer une méthodologie pour simuler numériquement les problèmes d'écoulements incompressibles avec surfaces libres en incluant l'adaptation de maillage. Notre but était de proposer une méthodologie qui soit générale, c'est-à-dire ayant la capacité de traiter un grand nombre de problèmes ; la plus simple possible, c'est-à-dire sans stratégie particulière pour résoudre les problèmes au cas par cas ; et qui soit numériquement performante et précise, c'est-à-dire avec une complexité algorithmique contrôlée tout en optimisant la précision des calculs.

La méthodologie que nous avons proposée permet de prendre en compte la simulation numérique de phénomènes physiques régis par les forces de tension superficielle. Le développement d'une méthodologie numérique pour la modélisation de la force capillaire était notre premier objectif. Après avoir clairement identifié l'ensemble des définitions possibles de la pseudo-concentration, les difficultés auxquelles nous étions confrontés étaient de calculer avec précision la normale et la courbure de l'interface en se basant sur cette variable. La pseudo-concentration est une variable qui présente localement soit de très importantes variations, soit aucune variation, et pour reconstruire les dérivées du premier et du second ordre, nous avons besoin d'opérateurs de reconstructions robustes, c'est-à-dire avec une sensibilité minimale. L'utilisation de reconstructions locales aux moindres carrés répondaient à nos besoins. Nous avons donc développé et testé un ensemble de méthodes. Ce sont des opérateurs linéaires et leur utilisation est omniprésente dans nos simulations numériques. Pour des préoccupations de performance, nous avons proposé une méthode permettant de construire la représentation matricielle globale de ces opérateurs. Cette reconstruction des dérivées peut être considérée comme un générateur de

formules de différences finies sur des maillages non structurés. Elle est réduite à un simple produit matrice-vecteur (creux), et peut ainsi être utilisée dans des processus d'optimisation sans contribuer à détériorer leur performance. Cependant, pour profiter des avantages de cette approche, nous devons être prêts à ce que le coût mémoire soit plus important puisque le nombre de matrices (creuses) supplémentaires à stocker est égal à la dimension du problème traité. Si le coût mémoire est un problème, il est tout à fait raisonnable d'utiliser les approches proposées par Zienkiewicz et Zhu et de ne stocker qu'une seule matrice pour effectuer ces calculs. Par ailleurs, une utilisation rigoureuse des reconstructions aux moindres carrés nécessite l'utilisation de maillages satisfaisant certaines propriétés pour garantir les propriétés d'unicité et de convergence. Une perspective importante est d'inclure ces contraintes dans les logiciels de génération et d'adaptation de maillage, développés par le laboratoire MAGNU, dans le but d'offrir des maillages garantissant des propriétés de convergence pour la méthode des éléments finis.

Le calcul de la courbure basé sur la pseudo-concentration souffre de bruits numériques importants causés par la présence de discontinuités dans la normale calculée. Cette faiblesse a été exploitée comme information essentielle pour supprimer les bruits numériques et les résultats obtenus sont satisfaisants (cf. chapitres 2 et 3). Pour valider notre modélisation de la tension superficielle, nous avons retenu des phénomènes physiques qui reflètent des situations d'équilibre avec le problème de Laplace. La mesure de l'intensité des courants parasites est le critère que nous avons choisi pour mesurer la qualité de notre méthodologie. Cette validation nous a permis d'apprécier l'importance de la discrétisation utilisée pour calculer la force capillaire volumique. Une étude plus approfondie sur la compatibilité des espaces utilisés est une perspective qu'il est nécessaire de prendre en compte.

Nous avons exploité une autre approche pour calculer la force capillaire volumique. Cette approche s'appuie sur notre deuxième objectif : la réinitialisation

de la pseudo-concentration. Une discrétisation explicite et temporaire de la surface libre est calculée. C'est une discrétisation linéaire par morceaux. Il est nécessaire que cette discrétisation soit continue. Il faut noter qu'un traitement particulier doit être appliqué lorsque nous travaillons avec des fonctions discrètes discontinues par élément. La reconstruction explicite de l'interface est utilisée pour calculer une fonction distance signée, notre but étant de pouvoir calculer la normale et la courbure avec une meilleure précision. Lorsque la discrétisation est de nature linéaire, la courbure calculée uniquement basée sur cette représentation paramétrique est nulle presque partout. Pour résoudre ce problème, nous avons proposé une idée originale qui consiste à appliquer un schéma de subdivision (approximante et non interpolante car sinon des problèmes de topologie surviennent) afin de transformer la paramétrisation linéaire en une paramétrisation splinaire de degré 3. L'information de courbure obtenue est de bien meilleure qualité, particulièrement dans les zones de fortes courbures où la résolution du maillage est pauvre. Cependant, elle n'est pas totalement satisfaisante. D'une part les variations de courbure sont trop importantes et d'autre part les taux de convergence sont limités car l'utilisation des interpolants de degré supérieur à 2 n'implique pas une amélioration des taux de convergence. Ceci est dû à la nature cubique de la reconstruction. La méthodologie développée permet d'identifier les différentes entités de fluides ainsi que la détection de la nature des différentes surfaces libres (courbes ouvertes, courbes fermées). Notre méthodologie présente ainsi l'avantage de pouvoir calculer la distance entre les surfaces libres, c'est-à-dire de déterminer une partie des axes médians.

Pour rendre compétitive la méthode de la pseudo-concentration, nous avons identifié deux possibilités que nous avons utilisées conjointement : détenir une résolution fine du maillage dans un voisinage de l'interface dans le but de contrôler les erreurs d'interpolation liées à la pseudo-concentration et définir une méthodologie permettant l'utilisation des interpolants de hauts degrés. Pour répondre à ces besoins, nous

avons utilisé l'adaptation de maillage et nous avons appliqué la méthode de Galerkin discontinue pour résoudre numériquement l'équation de transport. L'utilisation de la méthode de Galerkin discontinue nous a conduit à une définition plus performante numériquement de la pseudo-concentration, par le biais d'une décomposition dans une base orthonormale de l'espace $L^2(K)$. Cette approche permet d'utiliser des interpolants plus riches, de mesurer l'erreur d'interpolation par les sauts sur les arêtes, de localiser facilement l'interface en détectant les « discontinuités », de proposer des estimateurs d'erreur peu coûteux, et de permettre une p-adaptivité (que nous n'avons pu inclure dans cette thèse). Faisant partie de nos deuxième et troisième objectifs spécifiques il y a l'application d'un processus d'optimisation de la discrétisation des équations aux dérivées partielles. L'adaptation de maillage est un processus d'optimisation visant à calculer une triangulation dans le but de minimiser l'erreur fournie par un estimateur. Le but est d'obtenir des simulations numériques les plus précises possibles pour une complexité algorithmique donnée. Cette technologie est indispensable pour permettre aux méthodes eulériennes d'être compétitives vis-à-vis des méthodes lagrangiennes. Cela répondait au besoin de détenir une résolution fine du maillage dans un voisinage de l'interface. Nous avons travaillé avec des maillages anisotropes qui présentent l'avantage de permettre une réduction importante du nombre de degrés de liberté par rapport aux maillages isotropes. Cependant pour ce type de maillage, les preuves de convergence ne sont pas claires et des travaux réalisés par Alauzet confirment la sensibilité des simulations effectuées sur de tels maillages. Il y a une analyse de sensibilité à effectuer dans le futur.

Le processus d'adaptation de maillage présente deux difficultés : capturer l'évolution des surfaces libres avec un minimum d'effort et interpoler une fonction de type éléments-finis entre deux maillages. Avec une approche classique, capturer l'évolution des surfaces libres nécessite un effort algorithmique que nous avons jugé trop

important : plusieurs itérations sont nécessaires alors que le coût de la résolution des équations de Navier-Stokes est important. Nous avons proposé un prédicteur en résolvant uniquement l'équation de transport à l'aide de la méthode de Galerkin discontinue, l'objectif étant d'obtenir une prédiction de la localisation en espace des surfaces libres. Une extension du schéma transitoire proposé par Guégan *et al.* (2010) nous a permis de mettre en évidence l'efficacité de cette approche par une réduction des itérations du processus d'adaptation de maillage. Nous avons développé un critère d'arrêt basé sur une mesure comparative de la métrique prescrite et de la métrique géométrique du maillage telle que proposée par Coupez (2010). L'interpolation sur les maillages est une composante clairement négligée dans la littérature. Les variables interpolées ne vérifient plus les équations de Navier-Stokes. En particulier, la condition d'incompressibilité n'est plus satisfaite et pose des problèmes pour conserver convenablement la matière. De plus, il a été démontré que l'interpolation crée des erreurs de phases, i.e. un décalage en temps est introduit. Le nombre d'interpolations entre les maillages doit être minimisée dans le processus d'adaptation. Les méthodes disponibles pour effectuer cette étape ne sont pas très nombreuses. Nous avons développé une méthodologie générale et nous avons effectué une comparaison d'un ensemble de techniques. Nous voulions développer une méthodologie permettant d'interpoler les fonctions continues et les fonctions discontinues. L'approche la plus simple ne permet pas d'interpoler les fonctions discontinues. Nous nous sommes alors intéressés aux méthodes d'intersection de maillages, et la méthodologie proposée se base sur les techniques que nous avons utilisées pour discrétiser la surface libre. Cette technique nous permet de générer des formules de quadratures adaptatives. Dans un premier temps, des résultats indiquant une conservation exacte de la norme L^2 (globale) entre les deux maillages nous ont encouragés dans cette approche. La perspective de ce travail est de satisfaire la contrainte d'incompressibilité.

Nous avons abordé deux catégories de problèmes tests. La première catégorie porte sur la vérification des différents algorithmes numériques utilisés dans cette thèse. Le problème du disque tournant de Zalesak est un problème de vérification de la conservation de la quantité d'aire et de la conservation des discontinuités présentes à l'interface. La surface libre est ici considérée comme un objet. Le problème « vortex-in-box » vise à vérifier la conservation de la quantité de matière. La formation de filaments constitue un élément de vérification exigeant pour l'adaptation de maillage et la réinitialisation de la pseudo-concentration. Le problème de Laplace a été utilisé pour étudier le problème des courants parasites et la vérification du calcul de la force capillaire volumique.

RÉFÉRENCES

ALAUZET, F. (2003). *Adaptation de maillage anisotrope en trois dimensions. Application aux simulations instationnaires en Mécanique des Fluides*. Thèse de doctorat, Université de Montpellier, France.

ALAUZET, F. (2010). Size gradation control of anisotropic meshes. *Finite Elements in Analysis and Design*, 46, 181–202.

ALAUZET, F.; FREY, P.; GEORGE, P. et MOHAMMADI, B. (2007). 3D transient fixed point mesh adaptation for time-dependent problems : Application to CFD simulations. *Journal of Computational Physics*, 222, 592–623.

ALAUZET, F.; GEORGE, P.; MOHAMMADI, B.; FREY, P. et BOROUCHAKI, H. (2003). Transient fixed point-based unstructured mesh adaptation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 43, 729–745.

ALAUZET, F.; LOSEILLE, A.; DERVIEUX, A. et FREY, P. (2006). Multi-dimensional continuous metric for mesh adaptation. *Proceedings, 15th International Meshing Roundtable*.

ALAUZET, F. et MEHRENBARGER, M. (2010). P1-conservative solution interpolation on unstructured triangular meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84, 1552–1588.

ANGLADA, M.; GARCIA, N. et CROSA, P. (1999). Directional adaptive surface triangulation. *Computer Aided Geometric Design*, 16, 107–126.

APEL, T. ; BERZINS, M. ; JIMACK, P. ; KUNERT, G. ; PLAKS, A. ; TSUKERMAN, I. et WALKLEY, M. (2000). Mesh shape and anisotropic elements : Theory and practice. *JR Whiteman (ed.) : The Mathematics of Finite Elements and Applications X*, Elsevier, Amsterdam, 367–376.

ARYA, S. ; MOUNT, D. ; NETANYAHU, N. ; SILVERMAN, R. et WU, A. (1998). An optimal algorithm for approximate nearest neighbor searching fixed dimensions. *Journal of the ACM (JACM)*, 45, 891–923.

BABUŠKA, I. et RHEINBOLDT, W. (1978). Error Estimates for Adaptive Finite Element Computations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 15, 736–754.

BAKER, T. (1997). Mesh adaptation strategies for problems in fluid dynamics. *Finite Elements in Analysis and Design*, 25, 243–273.

BARDOS, C. (1970). Problèmes aux limites pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre à coefficients réels ; théorèmes d’approximation ; application à l’équation de transport. *Ann. Sci. École Normale Supérieure*, 4, 185–233.

BATCHELOR, G. (1967). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.

BEHR, M. (2004). On the application of slip boundary condition on curved boundaries. *International journal for numerical methods in fluids*, 45, 43–51.

BÉLIVEAU, A. ; FORTIN, A. et DEMAY, Y. (1998). A two-dimensional numerical method for the deformation of drops with surface tension. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 10, 225–240.

- BELL, J. ; COLELLA, P. et GLAZ, H. (1989). A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys*, 85, 257–283.
- BERZINS, M. (1997). Solution-based Mesh Quality for Triangular and Tetrahedral Meshes. *Proc. 6th International Meshing Roundtable, Sandia Lab*, 427–436.
- BOROUCHAKI, H. ; HECHT, F. et FREY, P. (1998). Mesh graduation control. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43, 1143–1165.
- BOROUCHAKI, H. ; GEORGE, P. ; HECHT, F. ; LAUG, P. et SALTEL, E. (1997). Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part I. Algorithms. *Finite Elements in Analysis and Design*, 25, 61–83.
- BRACKBILL, J. ; KOTHE, D. et ZEMACH, C. (1992). A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100, 335–354.
- BREZZI, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *Rev. Francaise Automat. Informat. Recherche Operationnelle Ser. Rouge*, 8, 129–151.
- CATMULL, E. et CLARK, J. (1978). Recursively generated b-spline surfaces on arbitrary topological meshes. *Computer-aided design*, 10, 350–355.
- CHORIN, A. et MARSDEN, J. (1979). *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer.
- CHRISTIE, I. ; GRIFFITHS, D. ; MITCHELL, A. et ZIENKIEWICZ, O. (1976). Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10, 1389–1396.

- CLAISSE, A. ; DUCROT, V. et FREY, P. (2009). Levelsets and anisotropic mesh adaptation. *Discrete and continuous dynamical systems*, 23, 165–183.
- CLAISSE, A. et FREY, P. (2008). Construction d’une courbe régulière d’approximation d’un ensemble de points. *Comptes Rendus Mathématique*, 346, 1017–1022.
- COCKBURN, B. ; KARNIADAKIS, G. et SHU, C. (2000). The development of discontinuous galerkin methods. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 11, 3–50.
- COUPEZ, T. (2010). Metric construction by length distribution tensor and edge based error for anisotropic adaptive meshing. *Journal of Computational Physics*.
- DAUTRAY, R. et LIONS, J. (1993). *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*. Springer Verlag.
- DETTMER, W. et PERIĆ, D. (2003). An analysis of the time integration algorithms for the finite element solutions of incompressible Navier–Stokes equations based on a stabilised formulation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192, 1177–1226.
- DEVALS, C. ; HENICHE, M. et BERTRAND, F. (2004). A filtering technique for solving the advection equation in two-phase flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*.
- DEVALS, C. ; HENICHE, M. et BERTRAND, F. (2007). A two-phase flow interface capturing finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 53, 735–751.

- ENGELMAN, M.; SANI, R. et GRESHO, P. (1982). The implementation of normal and/or tangential boundary conditions in finite element codes for incompressible fluid flow. *International journal for numerical methods in fluids*, 2, 225–238.
- ENGQUIST, B. et OSHER, S. (1980). Stable and entropy satisfying approximations for transonic flow calculations. *Mathematics of Computation*, 34, 45–75.
- ENRIGHT, D.; FEDKIW, R.; FERZIGER, J. et MITCHELL, I. (2002). A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 183, 83–116.
- FALK, R. et RICHTER, G. (1987). Analysis of a continuous finite element method for hyperbolic equations. *SIAM J. Num. Anal.*, 24, 257–278.
- FEDKIW, R.; ENRIGHT, D.; FERZIGER, J. et MITCHELL, I. (2002). A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 183, 83–116.
- FLAHERTY, J.; KRIVODONOVA, L. et REMACLE, J. (2002). Aspects of discontinuous galerkin methods for hyperbolic conservation laws. *Finite Element in Analysis and Design*, 38, 889–908.
- FORTIN, A. et BENMOUSSA, K. (2006). An adaptive remeshing strategy for free-surface fluid flow problems. part i : The axisymmetric case. *Journal of polymer engineering*, 26, 21–57.
- FORTIN, M. et FORTIN, A. (1985). A generalization of uzawa’s algorithm for the solution of the Navier-Stokes equations. *Communications in Applied Numerical Methods*, 1, 205–208.

- FREY, P. et ALAUZET, F. (2003). Estimateur d'erreur et métriques anisotropes pour l'adaptation de maillage. *Publication Inria Rocquencourt*.
- FRIES, T. et MATTHIES, H. (2004). A review of petrov-galerkin stabilization approaches and an extension to meshfree methods. *Informatikbericht Nr, 1*, 1–68.
- GAO, D. (1999). A three-dimensional hybrid finite element–volume tracking model for mould filling in casting processes. *International journal for numerical methods in fluids, 29*, 877–895.
- GEORGE, P. et BOROUCAKI, H. (1997). *Triangulation de Delaunay et maillage, application aux éléments finis*. Hermes.
- GIRAULT, V. et RAVIART, P. (1986). Finite element methods for Navier-Stokes equations : theory and algorithms. *NASA STI/Recon Technical Report A, 87*, 52227.
- GRESHO, P. et SANI, R. (1998). Incompressible flow and the finite element method. volume 1 : Advection-diffusion and isothermal laminar flow. *John Wiley and Sons, Inc., New York, NY (United States)*.
- GRESHO, P. ; SILVESTER, D. et GRIFFITHS, D. (2008). Adaptive time-stepping for incompressible flow part i : Scalar advection-diffusion. *Society for Industrial and Applied Mathematics*.
- GROOSS, J. et HESTHAVEN, J. (2006). A level set discontinuous galerkin method for free surface flows. *Computer methods in applied mechanics and engineering, 195*, 3406–3429.

GUÉGAN, D. ; ALLAIN, O. ; DERVIEUX, A. et ALAUZET, F. (2010). An L^∞ - L^p mesh-adaptive method for computing unsteady bi-fluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84, 1376–1406.

HABASHI, W. ; BOURGAULT, Y. ; FORTIN, M. ; DOMPIERRE, J. et VALLET, M. (1998). Anisotropic mesh adaptation- A step towards a mesh-independent and user-independent CFD. *Barriers and challenges in computational fluid dynamics*, 99–117.

HABASHI, W. ; FORTIN, M. ; DOMPIERRE, J. ; VALLET, M. et TAM, A. (1997). Anisotropic mesh optimization for structured and unstructured meshes. *28 th Computational Fluid Dynamics Annual Lecture Series, Rhode-Saint-Genese, Belgium*.

HOUSTON, P. ; RANNACHER, R. et SULI, E. (2002). A posteriori error analysis for stabilised finite element approximations of transport problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 2, 124–785.

HOUSTON, P. ; SÜLI, E. et SCHWAB, C. (2000). Discontinuous hp -finite element methods for advection-diffusion problems. Rapport technique 00-07.

HUANG, W. (2006). mathematical principles of anisotropic mesh adaptation. *Communications in computational physics*, 1, 276–310.

HUGHES, T. ; FRANCA, L. et BALESTRA, M. (1986). A new finite element formulation for computational fluid dynamics : V. circumventing the babuska-brezzi condition : A stable petrov-galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 59, 85–99.

JACKSON, D. et SOCIETY, A. M. (1930). *The theory of approximation*.

JAMET, D. ; TORRES, D. et BRACKBILL, J. (2002). On the theory and computation of surface tension : the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *Journal of Computational Physics*, 182, 262–276.

KAY, D. ; GRESHO, P. ; GRIFFITHS, D. et SILVESTER, D. (2010). Adaptive time-stepping for incompressible flow part ii : Navier-Stokes equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32, 111–128.

KRIVODONOVA, L. et FLAHERTY, J. (2003). Error estimation for discontinuous galerkin solutions of two-dimensional hyperbolic problems. *Advances in Computational Mathematics*, 19, 57–71.

KUNERT, G. (2002). Toward anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 18, 625–648.

LABBÉ, P. ; DOMPIERRE, J. ; VALLET, M. et GUIBAULT, F. (2011). Verification of three-dimensional anisotropic adaptive processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.

LAGUE, J. (2006). *Optimisation de maillage basée sur une erreur locale d'interpolation*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France.

LANG, J. et WALTER, A. (1995). An adaptive discontinuous finite element method for the transport equation. *Journal of Computational Physics*, 117, 28–34.

LAYTON, W. et POLMAN (1996). Oscillation absorption finite element methods for convection-diffusion problems. *SIAM J. Scientific Computing*, 17, 1328–1346.

LEBORGNE, G. (1992). *Simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques de type Oldroyd : utilisation d'éléments finis de degré 1*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Paris.

LESANT, P. et RAVIART, P. (1974). On a finite element method for solving the neutron transport equation. *Mathematical aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, Academic Press, New York, 88–123.

LOSEILLE, A.; ALAUZET, F. *et al.* (2009). Continuous mesh model and well-posed continuous interpolation error estimation.

MALIDI, A.; DUFOUR, S. et N'DRI, D. (2000). A study of time integration schemes for the numerical modeling of free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in fluids*, 16, 1–6.

MANZI, C.; RAPETTI, F. et FORMAGGIA, L. (2000). Function approximation on triangular grids : some numerical results using adaptive techniques. *Applied Numerical Mathematics*, 32, 389–399.

MARCHANDISE, E. (2006). *Simulation of three-dimensional two-phase flows : coupling of a stabilized finite element method with a discontinuous level set approach*. Thèse de doctorat, Université catholique de Louvain, Belgique.

MARCHANDISE, E. et REMACLE, J. (2006). A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for solving two phase incompressible flows. *Journal of computational physics*, 219, 780–800.

- MARKWARDT, C. (2012). Mpfir : Robust non-linear least squares curve fitting. *Astrophysics Source Code Library*, 1, 08019.
- MCKENZIE, S. ; DOMPIERRE, J. ; TURCOTTE, A. et MENG, E. (2009). On metric tensor representation, intersection, and union. Montréal, QC.
- MIDDLEMAN, S. (1995). *Modeling Axisymmetric Flows : Dynamics of Films, Jets and Drops*. Academic Press, San Diego.
- MOHAMMADI, B. et HECHT, F. (2001). Petrov-galerkin solutions of the incompressible Navier-Stokes equations in primitive variables with adaptive remeshing. *Mesh adaptation for time dependent simulation, optimization and control*, 10, 575–593.
- MOUNT, D. et ARYA, S. (1997). ANN : A library for approximate nearest neighbor searching. *Center for Geometric Computing 2nd Annual Workshop on Computational Geometry*.
- NOH, W. et WOODWARD, P. (1976). Slic (simple line interface calculation). *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28–July 2, 1976 Twente University, Enschede*. Springer, 330–340.
- OLSSON, E. et KREISS, G. (2005). A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics*, 210, 225–246.
- OLSSON, E. ; KREISS, G. et ZAHEDI, S. (2007). A conservative level set method for two phase flow ii. *Journal of Computational Physics*, 225, 785–807.
- ORTEGA, J. (1987). *Matrix Theory : a second course*. Springer.

OSHER, S. et FEDKIW, R. (2003). *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer.

OSHER, S. et SETHIAN, J. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed-algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79, 12–49.

OWEN, S. ; STATEN, M. et SORENSEN, M. (2012). Parallel hex meshing from volume fractions. *Proceedings of the 20th International Meshing Roundtable*, 161–178.

PAGE, M. ; FARINAS, M. et GARON, A. (1997). Imposition of slip boundary conditions without the explicit computation of consistent normals. *Communications in numerical methods in engineering*, 13, 949–961.

PICASSO, M. (2006). Adaptive finite elements with large aspect ratio based on an anisotropic error estimator involving first order derivatives. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196, 14–23.

POPINET, S. et ZALESKI, S. (1999). A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30, 775–793.

QUARTERONI, A. ; SACCO, R. et SALERI, F. (2006). *Numerical mathematics*, vol. 37. Springer.

RATHOD, H. ; VENKATESUDU, B. ; NAGARAJA, K. et ISLAM, M. (2007). Gauss Legendre–Gauss Jacobi quadrature rules over a tetrahedral region. *Applied Mathematics and Computation*, 190, 186–194.

REED, W. et HILL, T. (1973). Triangular mesh methods for the neutron transport equation. *Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos Laboratory, Los Alamos.*

REMACLE, J.; CHEVAUGEON, N.; MARCHANDISE, É. et GEUZAIN, C. (2007). Efficient visualization of high-order finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69, 750–771.

RENARDY, Y. et RENARDY, M. (2002). Prost : a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of Computational Physics*, 183, 400–421.

RUDMAN, M. (1997). VOLUME-TRACKING METHODS FOR INTERFACIAL FLOW CALCULATIONS. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24, 671–691.

SADHAL, S.; AYYASWAMY, P. et CHUNG, J. (1997). *Transport Phenomena with Drops and Bubbles*. Mechanical Engineering Series, Springer-Verlag, NewYork.

SCARDOVELLI, R. et ZALESKI, S. (1999). Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31, 567–603.

SCHENK, O. et GÄRTNER, K. (2004). Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with pardiso. *Future Generation Computer Systems*, 20, 475–487.

SETHIAN, J. (1999). *Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, Computer-Aided Design, Optimal Control and Material Sciences*. Cambridge University Press.

SHAKIB, F. ; HUGHES, T. et JOHAN, Z. (1991). A new finite element formulation for computational fluid dynamics : X. the compressible euler and Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 89, 141–219.

SMEREKA, P. ; SUSSMAN, M. et OSHER, S. (1994). A levelset approach for computing solutions to incompressible two phase flow. *J. Comput. Phys*, 114, 149–159.

SMITH, A. et SILVESTER, D. (1997). Implicit algorithms and their linearization for the transient incompressible Navier-Stokes equations. *IMA journal of numerical analysis*, 17, 527–545.

SUSSMAN, M. et FATEMI, E. (2003). An efficient, interface-preserving level set re-distancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *J. Comput. Phys*, 187, 110–136.

SUSSMAN, M. ; FATEMI, E. ; SMEREKA, P. et OSHER, S. (1998). An Improved Level Set Method for Incompressible Two-phase Flows. *Computers & Fluids*, 27, 663–680.

SUSSMAN, M. et PUCKETT, E. (2000). A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162, 301–337.

SUSSMAN, M. et SMEREKA, P. (1997). Axisymmetric free boundary problems. *Journal of Fluid Mechanics*, 341, 269–294.

SUSSMAN, M.; SMEREKA, P. et OSHER, S. (1994). A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, 114, 146–159.

TCHON, K.; DOMPIERRE, J.; VALLET, M.; GUIBAULT, F. et CAMARERO, R. (2006). Two-dimensional metric tensor visualization using pseudo-meshes. *Engineering with Computers*, 22, 121–131.

TEZDUYAR, T.; ALIABADI, S. et BEHR, M. (1998). Enhanced-discretization interface-capturing technique (edict) for computation of unsteady flows with interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155, 235–248.

TEZDUYAR, T.; MITTAL, S.; RAY, S. et SHIH, R. (1992). Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 95, 221–242.

TORNBERG, A. (2002). Multi-dimensional quadrature of singular and discontinuous functions. *BIT Numerical Mathematics*, 42, 644–669.

TORNBERG, A. et ENGQUIST, B. (2000). A finite element based level-set method for multiphase flow applications. *Computing and Visualization in Science*, 3, 93–101.

TORRES, D. et BRACKBILL, J. (2000). The point-set method : front-tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 165, 620–644.

TOUZANI, R. (1988). Implementation of the discontinuous finite element method for hyperbolic equations. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, 68, 115–123.

UNVERDI, S. et TRYGGVASON, G. (1992). Computations of multi-fluid flows. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 60, 70–83.

VALLET, M. (1992). *Génération de maillages éléments finis anisotropes et adaptatifs*. Thèse de doctorat, Université de Paris VI, Paris, France.

VALLET, M.; HECHT, F. et MANTEL, B. (1991). Anisotropic control of mesh generation based upon a Voronoi type method. *Numerical grid generation in computational fluid dynamics and related fields*, 93–103.

XIANGRONG, L.; REMACLE, J. et SHEPHARD, M. (2004). Anisotropic mesh graduation control. *Comp. Fluid Dyn.*, 16, 79–99.

XU, J.; ZHANG, Z. *et al.* (2004). Analysis of recovery type a posteriori error estimators for mildly structured grids. *Mathematics of Computation*, 73, 1139–1152.

YANG, X.; JAMES, A. *et al.* (2006). An adaptive coupled level-set/volume-of-fluid interface capturing method for unstructured triangular grids. *Journal of Computational Physics*, 217, 364–394.

ZAKI, A.; PELLETIER, P. et FORTIN, A. (1994). Adaptative remeshing for hyperbolic transport problems. *Comp. Fluid Dyn.*, 3, 79–99.

ZHANG, Z. et NAGA, A. (2005). A New Finite Element Gradient Recovery Method : Superconvergence Property. *SIAM JOURNAL ON SCIENTIFIC COMPUTING*, 26, 1192.

ZIENKIEWICZ, O. et ZHU, J. (1987). A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International journal for numerical methods in engineering*, 24, 337–357.

ZIENKIEWICZ, O. et ZHU, J. (1992). The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1 : The recovery technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33.